

Messungen differentieller, elastischer Wirkungsquerschnitte  
an den Systemen He-Kr, He-Xe

Diplomarbeit

vorgelegt von

Burkhard Schmidt

aus

Osnabrück

angefertigt

im Institut für angewandte Mechanik und Strömungsphysik  
der Georg-August-Universität zu Göttingen

## Inhaltsverzeichnis

	<u>Seite</u>
1. Die Stoßsysteme Helium-Krypton und Helium-Xenon	1
2. Apparaturbeschreibung	3
2.1. Charakterisierung der Streuapparatur	3
2.2. Vakuumsystem	4
a) Strahlquellenkammern	4
b) Streukammer	6
c) Detektorkammer	7
2.3. Nachweissystem	10
a) Elektronenstoßionisator	10
b) Quadrupolmassenfilter	11
c) Kanalelektronenvervielfacher	13
2.4. Strahlquellen	15
3. Geschwindigkeitsmessungen an Düsenstrahlen	17
3.1. Düsenstrahlen	17
3.2. Flugzeitanalysen	19
a) Vorbemerkungen zur Geschwindigkeitsmessung	19
b) Pseudostatistische Modulation	21
c) Eichung der Verzögerungszeiten	23
d) Auflösungsvermögen	26
4. Kreuzstrahlexperimente	28
4.1. Messung von Winkelverteilungen	28
4.2. Digitales Lock-In-Verfahren	28
4.3. Nullpunktskorrektur	31
4.4. Streugeometrie	32
4.5. Einfluß von Restgas in der Streukammer	34
4.6. Streuvolumenkorrektur	37
5. Bestimmung des Wechselwirkungspotentials	39
5.1. Untersuchung der Mittelungseinflüsse bei differentiellen Streuquerschnitten	40

5.2. Die Apparaturmittelungsfunktion	48
a) Berechnung der Apparaturmittelungsfunktion nach der Monte-Carlo-Methode	48
b) Diskussion der Ergebnisse	50
c) Fehlerbetrachtung	54
5.3. Das Anpassungsprogramm	56
a) Berechnung der Querschnitte	56
b) Mittelung der Querschnitte	60
c) Vergleich mit experimentellen Werten	64
d) Potentialanpassung	66
5.4. Berechnung der zweiten Virialkoeffizienten	66
6. Bestimmung des Helium-Xenon-Potentials	68
6.1. HFD-Potentialmodell	68
6.2. Nulldurchgang des Potentials	70
6.3. Topftiefe des Potentials	74
6.4. Ermittlung des besten Potentials	79
6.5. Vergleich mit Literaturwerten	81
7. Helium-Krypton-Querschnitte	89
7.1. Potentialmodell	89
7.2. Vergleich der Literaturwerte	90
7.3. Diskussion der Meßergebnisse	90
8. Querschnittsberechnungen für das System Neon-Methan	94
8.1. Einleitung	94
8.2. Vergleich der bisher veröffentlichten Potentiale	94
8.3. Bestimmung eines neuen isotropen Potentials	96
8.4. Zusammenfassung	101
9. Zusammenfassung der Ergebnisse	102
Anhang: Werte der experimentellen Winkelverteilungen	
Literaturhinweise	

## 1. Die Stoßsysteme Helium-Krypton und Helium-Xenon

Die Wechselwirkung der asymmetrischen Edelgaspaare ist im Gegensatz zu der der symmetrischen Paare noch immer Gegenstand vieler Veröffentlichungen, da die zugrunde liegenden Potentiale, insbesondere für das hier untersuchte System Helium-Xenon, noch immer nicht mit gleich hoher Genauigkeit bekannt sind. Ein typisches Beispiel ist die Abweichung in den Werten für die Tiefe des Potentialtopfes für Helium-Xenon von immerhin 10% zwischen den bei [Smith et al., 77] und bei [Danielson u. Keil, 88] publizierten Werten, die in dieser Arbeit zu klären sein wird. Die Ursachen für die Probleme liegen zum einen darin, daß auch die Edelgasmischungen mit Helium aufgrund der Vielzahl der Elektronen zu kompliziert sind, um in ab-initio Berechnungen für die vorliegende schwache van der Waals-Wechselwirkung gute Ergebnisse zu liefern, und zum anderen sind die Meßdaten nicht gut genug: Die gemessenen Virialkoeffizienten für Gasmischungen sind weniger genau als bei reinen Gasen, die differentiellen Streuquerschnitte weisen keine Symmetrieoszillationen auf, und Regenbogenoszillationen (s.u.) wie bei den Systemen aus zwei schweren Edelgasen können bei experimentell gut erreichbaren Strahltemperaturen nicht beobachtet werden.

Ein erst kürzlich erschlossenes Anwendungsgebiet, wo die Kenntnis genauer Wechselwirkungspotentiale von Atomen oder Molekülen von großer Bedeutung ist, ist die Oberflächenphysik. Bei [Jonsson u. Weare, 86] wird über Streuung von Heliumatomen an einem Graphitkristall, dessen Oberfläche mit Krypton bedeckt ist, berichtet. Während hier die Experimente mit Berechnungen im Einklang stehen, ist bei entsprechenden Messungen mit Xenon eine gute Übereinstimmung bisher nicht zu erreichen. Es wird vermutet, daß Experimente dieser Art sehr empfindlich auf die Helium-Xenon-Wechselwirkung reagieren und daß die bei den Berechnungen verwendeten Potentiale nicht genau genug sind.

Zur genaueren Bestimmung der Potentialfunktion werden daher hochauflösende Kreuzstrahlexperimente durchgeführt. Seit Bereitstellung der entsprechenden experimentellen Techniken hat sich die Auswertung differentieller, elastischer Streuquerschnitte durch Inversions- oder Anpassungsverfahren als überlegene Methode erwiesen, um Details des Wechselwirkungspotentials von Systemen zu bestimmen, die spektroskopisch nur schwer untersucht werden können [Buck, 88]. Bei den hier diskutierten van-der-Waals-Systemen, die durch geringe Topftiefen und kleine reduzierte Massen charakterisiert sind, stellen bei den Stoßenergien um 25meV und 65meV, bei denen die Messungen durchgeführt werden, Diffraktionsoszillationen die dominierende Struktur der Querschnitte dar. Die Abstände dieser Oszillationen liegen hier bei mehreren Grad und können im Experiment gut aufgelöst werden. Unter Berücksichtigung des Einflusses der Apparaturmittelung auf die gemessenen Winkelverteilungen können die aus einem Potential berechneten Querschnitte durch Simulation der Mittelung direkt mit den Messungen verglichen werden. Beim System He-Xe wird durch gleichzeitiges Anpassen zweier Parameter eines HFD-Potentials eine sehr genaue neue Potentialfunktion ermittelt.

## 2. Apparaturbeschreibung

### 2.1. Charakterisierung der Streuapparatur

Die Experimente zu dieser Arbeit wurden an einer relativ neuen Streuapparatur durchgeführt, die erstmals bei [Otten, 83] beschrieben worden ist. Hier soll nur kurz auf die grundlegenden Konzepte eingegangen werden:

Es handelt sich um eine universelle Kreuzstrahlapparatur, deren Konstruktion eine Vielzahl verschiedener Experimente ermöglicht. Die besonders groß dimensionierten Ofenkammern erlauben die Verwendung unterschiedlicher Strahlquellen. Das Nachweissystem befindet sich, im Gegensatz zu vielen anderen Kreuzstrahlapparaturen, außerhalb der Streukammer und ist um das Streuzentrum schwenkbar. Dadurch ist der Detektor einfach zugänglich und das bisher eingebaute Nachweissystem, bestehend aus Elektronenstoßionisator, Quadrupolmassenfilter und Kanalelektronenvervielfacher, kann ohne großen Aufwand um einen Fluoreszenzlichtdetektor oder ein Bolometer erweitert werden.

Nach den ersten Experimenten mit einem Alkaliofen und einem dazu gehörenden Rückgewinnungssystem [Winter, 86] sind dann im Rahmen einer Dissertation [Kesper, 87] neben einigen Experimenten zur reaktiven Streuung Messungen der Fragmentation von Mikroclustern durchgeführt worden. An stoßselektierten NO-Clustern wurden Flugzeitanalysen gemacht. Die Anwendung dieser Methode und die Grenzen des Auflösungsvermögens der neuen Apparatur wurden in der genannten Arbeit ausführlich diskutiert.

In dieser Arbeit werden zum ersten Mal hochaufgelöste differentielle Streuquerschnitte quantitativ ausgewertet, die an dieser Apparatur gemessen worden sind, wobei auch die Einflüsse einiger Besonderheiten der neuen Konstruktion auf die Messung diskutiert werden: Vor allem Fragen der Streugeo-

metrie und ihrer Auswirkungen auf die Mittelung der gemessenen Wirkungsquerschnitte sowie Restgasstreuung in der Streukammer (siehe Kapitel 4.5.) werden erörtert.

## 2.2. Vakuumsystem

Die Apparatur besteht aus sechs Kammern:

- a) Zwei Strahlquellenkammern (Ofenkammern)
- b) Die Streukammer
- c) Drei Detektorkammern

Der grobe Aufbau des Vakuumsystems wird hier beschrieben. Weitere Informationen und Zeichnungen finden sich bei [Otten, 83], [Winter, 86] und [Kesper, 87].

### a) Strahlquellenkammern:

Primär- und Sekundärstrahlkammer sind aus Edelstahlrohren von 500mm Durchmesser und 450mm Länge angefertigt und erlauben auch die Montage von besonders aufwendigen Strahlquellen. Die Konusse am vorderen Ende der Ofenkammern ragen in die dreieckige Streukammer hinein, um den Abstand vom Streuzentrum zu den Strahlquellen möglichst gering zu halten. Die Strahlquellenkammern laufen auf Gleitschienen und können zurückgefahren werden. Durch ein spezielles System von Verschraubungen ist es möglich, die Kammern mit oder ohne diesen Konus zu bewegen, so daß je nach Bedarf die Streukammer oder das vordere Ende der Strahlquellenkammern geöffnet und Wartungsarbeiten zugänglich gemacht werden kann. In der Spitze jedes Konus befindet sich primärseitig ein 25mm, sekundärseitig ein 14mm langer Strahlabschäler (Skimmer). Dieser dient dazu, nur den Kern des Strahls in die Streukammer

gelangen zu lassen, während die Gaspartikel aus der äußeren Region des Strahls von der kegelförmigen Außenseite des Skimmers zur Seite abgelenkt werden. Die Skimmeröffnung (780µm bzw. 630µm Durchmesser) ist die einzige Verbindung zwischen Ofenkammer und Streukammer, weshalb der Druck in der Streukammer um 2 bis 3 Größenordnungen kleiner gehalten werden kann.

Bepumpt werden die Strahlquellenkammern von direkt darunter hängenden Öldiffusionspumpen (Varian VHS 10, Saugvermögen 5400 l/s), die durch 2 bis 3m lange Verbindungsleitungen (Innendurchmesser 65mm) mit den Wälzkolbenpumpen (Leybold Heräus WS, 500 m<sup>3</sup>/h) und den Drehschieberpumpen (Alcatel 2100 A, 100 m<sup>3</sup>/h) verbunden sind. Sie stehen wegen der Geräusch- und Wärmeentwicklung in einem Nebenraum. Zusätzlich sind von oben in die Kammern noch Kühlfallen eingehängt, an denen Öldämpfe aus den Diffusionspumpen oder sonstige bei der Temperatur von flüssigem Stickstoff kondensierbarer Gase sich niederschlagen.

Im Leerlaufbetrieb erzeugen die Öldiffusionspumpen mit den Vorvakuumpumpen ein Hochvakuum von 10<sup>-5</sup> bis 10<sup>-6</sup> mbar. Nach Füllen der Kühlfallen wird ein Enddruck von 10<sup>-6</sup> bis 10<sup>-7</sup> mbar erreicht. Bei der Strahlerzeugung werden die Wälzkolbenpumpen zusätzlich eingeschaltet. Durch ihr hohes Saugvermögen garantieren sie, daß der Druck in der Kammer auch bei Verwendung intensiver Düsenstrahlen nicht zu sehr ansteigt. Als Beispiel sei hier ein Heliumdüsenstrahl angegeben: Bei Expansion aus einer 30µm-Düse bei Raumtemperatur kann der Druck in der Strahlquelle bis auf etwa 40 bis 50bar erhöht werden, ohne daß in der Strahlkammer der Druck über 10<sup>-3</sup> mbar steigt.

In der Sekundärstrahlkammer befindet sich unter der Strahlachse ein Lock-In-Chopper, dessen Scheibe mit ihrem oberen Teil sich 2 bis 3mm vor der Skimmerspitze befindet.



b) Streukammer:

Die Streukammer besteht aus einem Hauptteil in Form eines rechtwinkligen Dreiecks und der angesetzten Streukammerkuppel.

In den Hauptteil ragen die beiden Konusse der Strahlquellenkammern herein. Das Ende des Sekundärstrahlkammerkonus hat 26mm Abstand vom Streuzentrum, das Ende des Primärkonus ist dagegen 141mm entfernt, so daß hier noch Platz für den Flugzeitchopper und eine zusätzliche Blende zur Strahlkollimation ist.

An der Hypothenuse des dreieckigen Hauptteils ist die Streukammerkuppel befestigt, ein Halbzylinder, dessen Achse durch das Streuzentrum geht. Die Kuppel hat innen einen Durchmesser von 102mm bei einer Höhe von 300mm. Diese Abmessungen der Streukammer sind im Vergleich zu anderen Kreuzstrahlapparaturen besonders klein, was auf das Prinzip des außenliegenden Detektors zurückzuführen ist. Die Auswirkungen dieser Besonderheit werden in Kapitel 4.5. besprochen.

Die Öldiffusionspumpe (VARIAN VHS 10, 5400 l/s) mit wassergekühltem Ölfänger erreicht in Verbindung mit der Drehschieberpumpe (ALCATEL 2030, 33 m<sup>3</sup>/h) im Leerlauf einen Enddruck von  $10^{-6}$  bis  $10^{-7}$  mbar bei gefüllter Kühlfalle. Nur bei ungünstigen Bedingungen (intensiver Sekundärstrahl bei kurzem Düse-Skimmer-Abstand) kann der Druck bis auf  $10^{-5}$  mbar ansteigen, während er sonst im Normalbetrieb bei 2 bis  $5 \cdot 10^{-6}$  mbar liegt.

Auf der äußeren Rundung der Streukammerkuppel sind zwei übereinander gleitende Segmente angebracht, die in der Ebene der beiden Strahlen um das Streuzentrum drehbar sind. Das äußere Segment trägt zwei um  $45^\circ$  versetzte

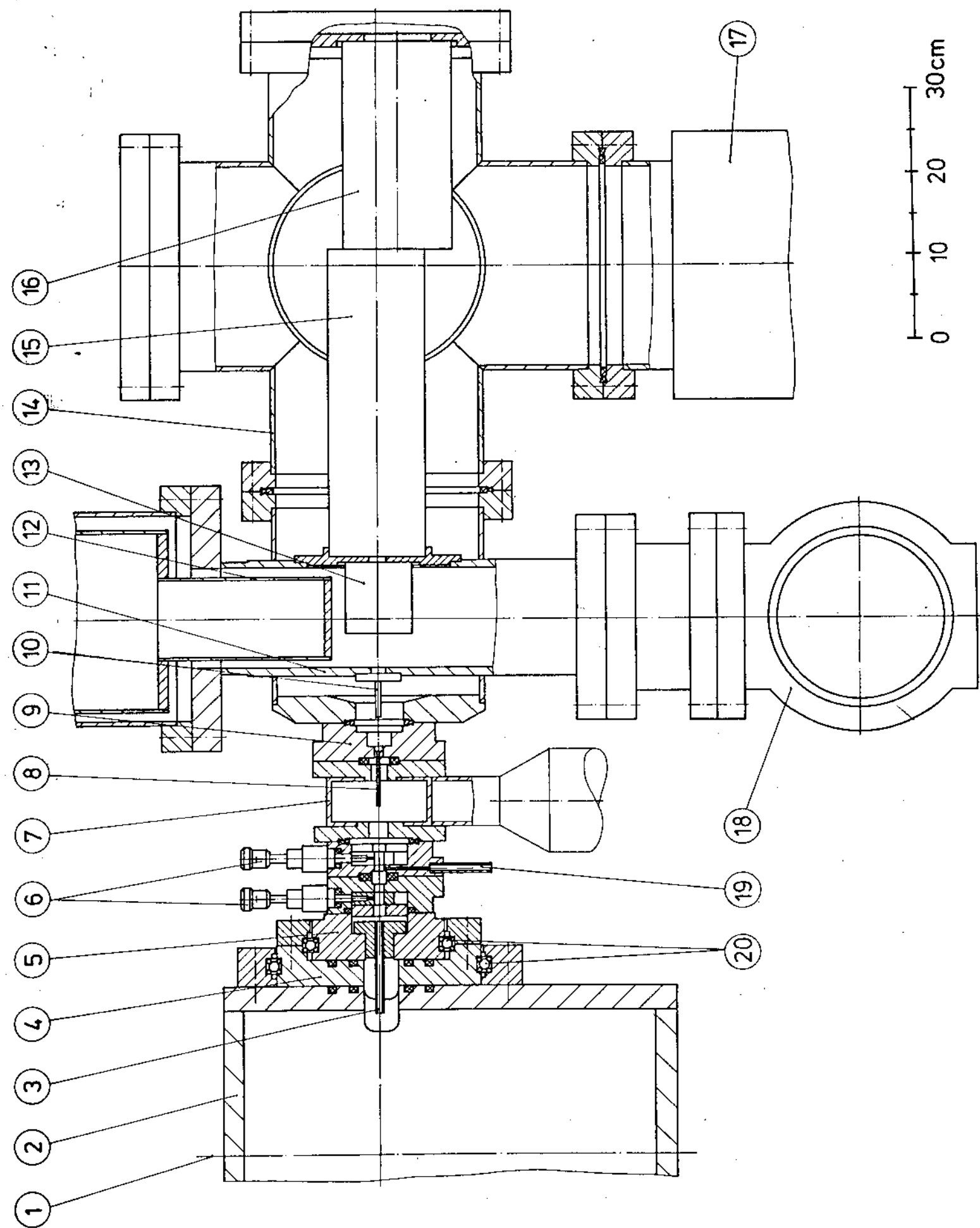
Ventile, die den Anschluß zum schwenkbaren Detektor bilden. Diese beiden Ventile sind so angebracht, daß sie einen Bereich von  $-3^\circ$  bis  $47^\circ$  bzw. von  $42^\circ$  bis  $92^\circ$  überstreichen können, wobei  $0^\circ$  der Richtung des Primärstrahls und  $90^\circ$  der des Sekundärstrahls entspricht. Hier wird nur der erste Bereich benutzt, da alle Meßpunkte zwischen  $0^\circ$  und  $46^\circ$  liegen, jedoch ist auch das Umflanschen von dem einen auf das andere Ventil problemlos.

Vom ersten Segmentventil ragt ein Röhrchen von 43mm Länge und 4mm Innendurchmesser ins Innere der Streukammerkuppel, das die Winkelakzeptanz und damit das Auflösungsvermögen des Detektors festlegt.

c) Detektorkammern:

Der ganze Detektorteil besteht aus drei Kammern, die mit den dazugehörigen Pumpen auf einer Lafette montiert sind. Die ganze Lafette ist in einem Winkelbereich von  $-3^\circ$  bis  $92^\circ$  in der Strahlebene schwenkbar. Sie wird von einem Schrittmotor (LENZE) bewegt, der durch ein CAMAC Output Register (OR 2027) auch vom Experimentrechner aus gesteuert werden kann. Der aktuelle Detektorwinkel wird von einem Winkelgeber (STEGMANN) mit einer Genauigkeit von  $\pm 0.01^\circ$  angezeigt. Er ist über ein Camac Input Register (2IR 2010) mit dem Rechner verbunden.

Die drei Kammern des Detektors sind als differentielle Pumpstufen ausgelegt, d.h. von einer Kammer zur nächsten ist der Druck schrittweise niedriger. Die Druckuntersetzung zwischen den Kammern wird durch schmale Leitwertröhrchen erreicht. Ein senkrechter Schnitt durch den ganzen Detektor ist in Abb. 1 gezeigt.



Zur Streukammer hin ist die Detektoreinheit durch ein faltenbalggedichtetes Ventil abschließbar. Daran schließt sich die nur 57.5mm lange Zwischenkammer an, die seitlich durch ein Knie von einer Turbomolekularpumpe (LEYBOLD HERÄUS, Turbovac 220, 220 l/s) bepumpt wird. Der Druck in dieser differentiellen Pumpstufe beträgt bei geöffnetem Ventil etwa  $3 \cdot 10^{-8}$  mbar. Bei Bedarf kann diese Kammer gegen eine längere (280mm) ausgetauscht werden, die auch den Laserfluoreszenzdetektor aufnimmt.

Durch ein UHV-Ventil ist die Detektorhauptkammer mit der Zwischenkammer verbunden. Sie wird durch eine magnetgelagerte Turbopumpe (LEYBOLD HERÄUS, Turbovac 560 M, 560 l/s) bis auf einen Enddruck von  $10^{-9}$  mbar evakuiert. Sie enthält den Quadrupol und den Kanalelektronenvervielfacher.

In den vorderen Teil der Hauptkammer ist die Ionisatorkammer eingebaut. Sie ist als vertikales Rohr mit quadratischem Querschnitt ausgelegt. Durch die in Relation zum geringen Kammervolumen große Pumpleistung der Zwillings-turbopumpe (PFEIFFER TPU 330, 330 l/s) in Verbindung mit der Kühlfalle, die mit flüssigem Stickstoff gefüllt wird, kann ein Enddruck von  $2 \cdot 10^{-10}$  mbar erreicht werden. Dieser besonders geringe Druck ist gerade an der Ionenquelle erforderlich, um möglichst wenige Restgaspartikel zu ionisieren.

Zwei Zwischenvakuumssysteme, bestehend aus je einer kleinen Öldiffusionspumpe (EDWARDS Diffstak 63, 135 l/s) und einer Drehschieberpumpe (ALCATEL 2012, 12 m<sup>3</sup>/h), erzeugen einen Vordruck von  $10^{-6}$  bis  $10^{-7}$  mbar. Das eine ist mit der Turbopumpe der Zwischenkammer, das andere mit den Turbopumpen der Hauptkammer und der Ionisatorkammer verbunden. Um das Eindringen von Öldampf zu verhindern, sind zwischen Diffusions- und Turbopumpen sog. Zeolith-Molekularsiebe montiert.

### 2.3. Nachweissystem

Der verwendete universelle Molekularstrahldetektor ist für den Nachweis von Neutralteilchen ausgelegt. Er besteht aus drei Komponenten:

#### a) Elektronenstoßionisator

Der Ionisator (Ionenquelle) hat die Aufgabe, die nachzuweisenden Neutralteilchen zu ionisieren und sie anschließend mit einer speziellen Elektrodenoptik auf die Eintrittsblende des Massenfilters zu fokussieren. Die Verwendung einer Ionenquelle als Nachweis bei einem Molekularstrahlexperiment wird ausführlich bei [Pauly und Toennies, 68] beschrieben. In der hier beschriebenen Apparatur ist eine Ionenquelle des Herstellers EXTRANUCLEAR LABORATORIES, Typ 041-1 eingebaut.

Ein zylinderförmiges Gitter, dessen Achse mit der Strahlachse zusammenfällt, beschleunigt die Elektronen, die außerhalb des Gitters von vier Heizdrähten emittiert werden, auf die Strahlachse zu, wo dann im Stoßprozeß die ankommenden Teilchen ionisiert werden. Dieses Gitter liegt, bezogen auf Masse, auf einem positiven Potential, das die Ionenenergie bestimmt. Aus dem Ionisationsvolumen werden die Ionen vom Extraktor, einer Blende mit negativem elektrischen Potential, abgezogen und gelangen in den Bereich der drei Linsen. Die zweite Linse liegt auf einem deutlich höheren Potential als die beiden anderen und gewährleistet dadurch einen fokussierenden Effekt. Da bei den Messungen der differentiellen Querschnitte stets dieselben Atome (Helium) nachgewiesen werden, wird die Ionenquelle so eingestellt, daß für diese Spezies größtmögliche Intensität erreicht wird. Dazu werden bei einer vorgegebenen Elektronenenergie von 100eV (Maximum des Ionisationsquerschnitts von Helium) die anderen Spannungen variiert. Eine Auflistung aller Einstellungen der Ionenquelle findet sich in Tabelle 1.

Die Ionenausbeute ist proportional zur Dichte der Teilchen im Ionisationsvolumen, folglich ist die Detektoreffizienz umgekehrt proportional zur Geschwindigkeit der am Ionisator ankommenden Teilchen. Um bei einem Streuexperiment die korrekte Winkelverteilung der gestreuten Intensität zu erhalten, muß das Signal mit der Geschwindigkeit der nachgewiesenen Partikel nach dem Stoß multipliziert werden.

Tabelle 1: Einstellung der Ionenquelle

Elektronenenergie	96.8 eV
Emissionsstrom	16.3 mA
Ionenenergie	+16.6 eV
Extraktor	-0.9 eV
Linse 1	-86.3 V
Linse 2	-1.4 V
Linse 3	-150.9 V

b) Das Quadrupolmassenfilter

Das Massenfilter ist zentraler Bestandteil des Universaldetektors. Hier wird ein Quadrupol vom Hersteller EXTRANUCLEAR LABORATORIES, Typ 270-9 verwendet. Die erste ausführliche Beschreibung von elektrischen Quadrupolfeldern zur Massenselektion findet sich bei [Paul et al., 58], hier soll nur kurz das Grundprinzip beschrieben werden:

Das Massenfilter besteht aus vier zylindrischen Edelstahlstäben, die parallel zur Achse um diese herum in Form eines Quadrats angeordnet sind. Ihr Durchmesser beträgt 16mm, die Länge 220mm. Jeweils zwei gegenüberliegende Elektroden sind miteinander verbunden, ein Paar wird mit der Spannung  $\phi(t)=U+V \cos(2\pi ft)$  versorgt, das andere Paar mit der gleichen Spannung aber umgekehrtem Vorzeichen. Hierbei ist U eine Gleichspannung, V und f sind Amplitude und Frequenz einer überlagerten Wechselspannung im Radiofrequenzbereich. Diese Feldanordnung wirkt massenselektiv: Aufgrund der besonderen Eigenschaften der Bewegungsgleichung für die Ionen (Mathieu'sche Differentialgleichung) können bei geeigneter Wahl von U, V und f nur Ionen mit einem bestimmten Verhältnis von Ladung e zu Masse m auf sinusförmigen Bahnen durch den Quadrupol zum Vervielfacher gelangen, alle anderen haben instabile Bahnen und treffen auf einer der Elektroden auf, wo sie rekombinieren.

Das Auflösungsvermögen des Massenfilters ist gegeben durch

$$(2.3.1.) \quad \frac{m}{\Delta m} = \frac{0.126}{0.16784 - \frac{U}{V}} .$$

Bei Eintritt in den Quadrupol außerhalb der Achse können nur Ionen, die innerhalb eines Kreises mit Radius

$$(2.3.2.) \quad a_{\max} \approx \frac{2}{3} r_0 \left( \frac{\Delta m}{m} \right)^{1/2}$$

eingeschossen werden, den Quadrupol passieren. Hierbei ist  $r_0$ , der halbe Abstand zwischen gegenüberliegenden Stäben, in cm und f in MHz angegeben. Die Obergrenze für die transversale kinematische Energie in eV, bis zu der Ionen durch den Quadrupol durchkommen können, ohne infolge zu großer Amplituden der Sinusbahnen die Stäbe zu berühren, beträgt

$$(2.3.3.) \quad E_{t,max} \approx \frac{1}{2} m f^2 r_0^2 \frac{\Delta m}{m} .$$

Daraus ergibt sich, daß die Wahl des Auflösungsvermögens auch die Transmission festlegt.

Da bei den in dieser Arbeit beschriebenen Messungen differentieller Wirkungsquerschnitte stets das Primärstrahlgas Helium nachgewiesen wird und das Streugas Krypton bzw. Xenon eine wesentlich größere Masse hat, werden an das Auflösungsvermögen nur geringe Anforderungen gestellt. Um die Transmission möglichst groß zu machen, kann daher die Auflösung auf einen niedrigen Wert eingestellt werden.

c) Kanalelektronenvervielfacher

Die Ionen werden hinter der Austrittsblende des Massenfilters vom elektrischen Feld des Kanalelektronenvervielfachers ("Channeltron"), der etwas außerhalb der Strahlachse montiert ist, angezogen. Beschleunigt durch die am Eintrittsende angelegte Hochspannung treffen die Ionen auf den Widerstandsbelag im Innern des gebogenen Channeltron-Röhrchens, wo sie Sekundärelektronen herausschlagen. Diese werden in Richtung zunehmenden Potentials abgelenkt, treffen auf die Wand und lösen ihrerseits wiederum Sekundärelektronen aus. Die so entstehende "Elektronenlawine" löst einen Strompuls an der Anode aus. Die an einem Ableitwiderstand abgegriffenen Spannungspulse haben eine Amplitude von 50mV bei einer Breite von 10µs. Sie werden in einem schnellen Vorverstärker (ORTEC Time Pick Off) verstärkt und über einen Diskriminator der weiteren Signalverarbeitung zugeleitet.

Für das hier verwendete Channeltron (BENDIX 4800) ist in Abb. 2 die Abhängigkeit der Zählrate von der Channeltronspannung dargestellt. Nach einem steilen Anstieg bei etwa 2kV erkennt man bei etwa 2.2 bis 2.6kV einen



Bereich mit geringerer Steigung. Dieser läßt sich folgendermaßen erklären: Da die Bahnen der Elektronen im Channeltron nicht festgelegt sind, läßt sich keine genaue Aussage über die Anzahl der Stufen der Vervielfachung und die Größe des Strompulses machen, der von einem Ion ausgelöst wird. Der ansteigende Teil der Verstärkungskurve entsteht nun dadurch, daß nur ein Teil der Impulse aus genügend Elektronen besteht, um die Ansprechschwelle der Zähl Elektronik zu übersteigen. Im Bereich der Sättigung nähert sich die Amplitude aller Pulse einer oberen Grenze, die durch die Raumladung der Elektronen im Channeltron bedingt ist.

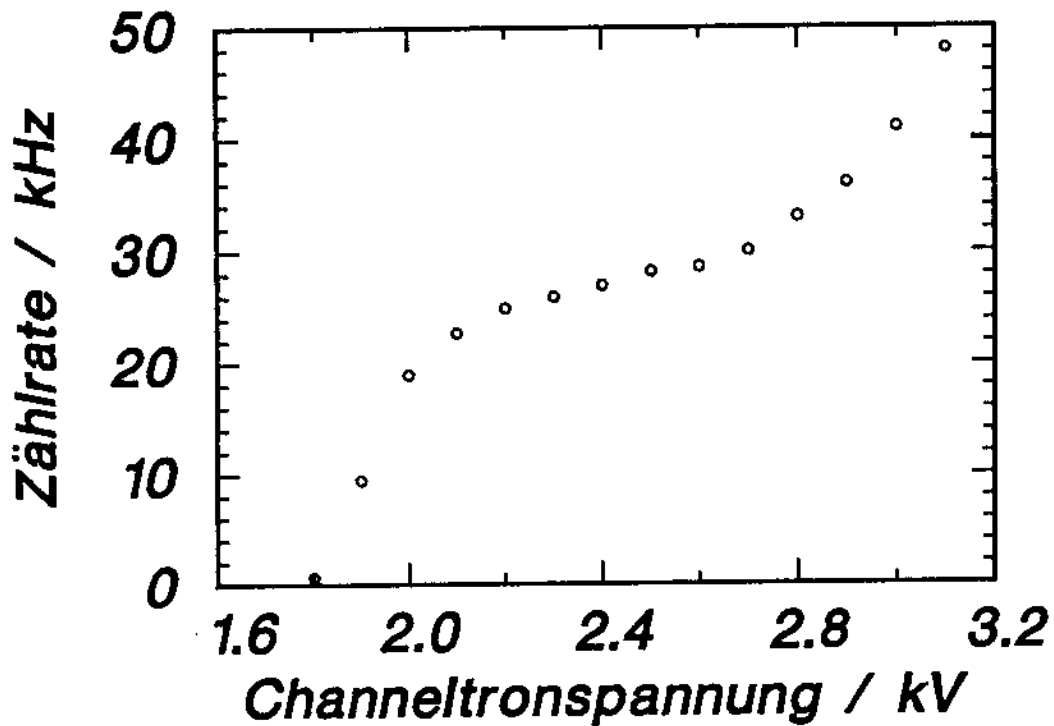


Abbildung 2: Verstärkungskurve des Channeltrons

Abhängigkeit der Zählrate von der angelegten Hochspannung (bei konstantem Streusignal)

Für die Messungen wird eine Spannung von 2450 V gewählt, die nach Angaben des Herstellers einer Verstärkung von etwa  $5 \cdot 10^7$  entspricht.

#### 2.4. Strahlquellen

In beiden Ofenkammern werden Gasstrahlquellen verwendet. Sie sind auf dreidimensionalen Justiervorrichtung befestigt, so daß die Öfen von außen auf die Achse Skimmer-Streuzentrum-Detektor justiert werden können und der Düse-Skimmer-Abstand einstellbar ist.

In der Sekundärstrahlkammer befindet sich eine bei [Otten, 83] beschriebene Quelle, in der Primärstrahlkammer ist eine modifizierte Quelle eingebaut, die von einem Ringkühlmantel umgeben ist. Abbildung 3 zeigt einen Längsschnitt durch diese Quelle. Ein Rohr führt das Strahlgas von der Zuleitung zur Düse. Auf einer Länge von 14 cm ist es von einem Ringkühlmantel umgeben, der etwa 0.5 Liter flüssigen Stickstoff aufnehmen kann. Die 12l fassende Kühlfalle dient beim Betrieb dieser Quelle gleichzeitig als Reservoir: Von hier fließt der flüssige Stickstoff durch einen Metallwellenschlauch in den Kühlmantel, von dort wird er durch einen zweiten Schlauch durch einen Flansch aus der Apparatur wieder herausgeleitet. Der Verbrauch beträgt etwa 2 bis 3 l/h.

Aufgrund der großen Kapazität des Kühlmantels bleibt die Temperatur nach einer Einkühlzeit von einigen Stunden in einem Bereich von  $\pm 1\text{K}$  konstant. Ein NiCrNi-Thermoelement am Düsenplättchen dient zur Überwachung der Temperaturkonstanz. Der absolute Wert der Temperatur liegt bei etwa 100K, er kann aus Flugzeitmessungen des Gasstrahls wesentlich genauer als mit dem Thermoelement bestimmt werden.

Beide Quellen sind für einen Druck von bis zu 200bar ausgelegt. Düsenplättchen mit Öffnungen bis herunter zu  $10\mu$  Durchmesser können montiert werden, wobei allerdings die Düsen von  $10\mu$  oder  $20\mu$  sich leicht durch Staubpartikel verschließen können.

Von der Möglichkeit, den vorderen Teil der Quelle zu heizen, wird hier kein Gebrauch gemacht.

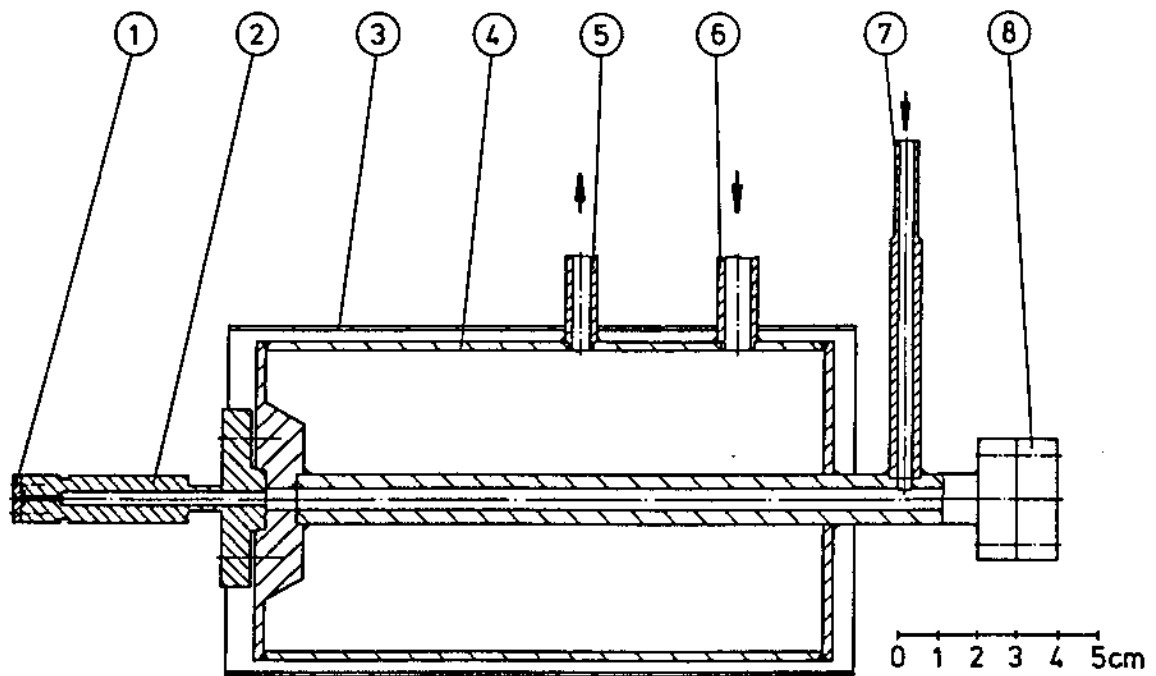


Abbildung 3: Strahlquelle mit Ringkühlfalle

- 1) Düsenplättchen
- 2) Gasofen
- 3) Abschirmblech
- 4) Ringkühlfalle
- 5) Austrittsöffnung für den fl. Stickstoff
- 6) Eintrittsöffnung für den fl. Stickstoff
- 7) Zuleitung für das Strahlgas
- 8) Blindflansch

### 3. Geschwindigkeitsmessungen an Strahlen

#### 3.1. Düsenstrahlen

Seit vielen Jahren werden Düsenstrahlen bei Kreuzstrahlexperimenten eingesetzt. Besondere Vorteile sind die geringen Breiten der Geschwindigkeits- und Winkelverteilung sowie die hohen Intensitäten.

Düsenstrahlen entstehen bei der Expansion eines Gases ins Vakuum. Von den sogenannten effusiven Strahlen unterscheiden sie sich dadurch, daß die freie Weglänge des Gases in der Quelle wesentlich kleiner als die Dimensionen der Düsenöffnung ist. Dann finden in der Expansionszone Stöße statt, die dazu führen, daß ein Großteil der freien Enthalpie in die kinetische Energie einer gerichteten Strömung umgewandelt wird.

Bei idealer, d.h. adiabatischer Expansion aus einer Quelle mit Temperatur  $T_0$  wird als maximale Strömungsgeschwindigkeit

$$(3.1.1.) \quad u_{\max} = \left( \frac{5k_B T_0}{m} \right)^{1/2}$$

für Gase, die aus Atomen der Masse  $m$  bestehen, erreicht. In realen Expansionen findet man eine thermische Restbewegung, die durch die Geschwindigkeit

$$(3.1.2.) \quad \alpha_s = \left( \frac{2kT_s}{m} \right)^{1/2}$$

charakterisiert wird. Hierbei gibt  $T_s$  die Temperatur im Strahl nach der Expansion an. Die Güte einer Expansion wird dann durch das Geschwindigkeitsverhältnis ("Speed-Ratio")

$$(3.1.3.) \quad S = \frac{u}{\alpha_s}$$

angegeben. Die Geschwindigkeitsverteilung, die man mit einem Dichtedetektor mißt, ergibt sich mit  $\alpha$  und  $u$  als Parametern zu

$$(3.1.4.) \quad f(v) \sim v^2 \exp\left[-\left(\frac{v-u}{\alpha_s}\right)^2\right] \quad .$$

Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit, das Maximum dieser Verteilung, liegt bei

$$v_w = \frac{u}{2} \left(1 + \left(1 + \frac{4}{S^2}\right)^{1/2}\right) \quad ,$$

die relative Halbwertsbreite beträgt

$$(3.1.5.) \quad \frac{\Delta v}{v_w} \approx \frac{1.66}{S} \quad .$$

Um in einem Streuexperiment annähernd monoenergetische Strahlen zu erhalten, muß man möglichst hohe Geschwindigkeitsverhältnisse erreichen. Dazu soll das Produkt aus Quellendruck  $p_0$  und Düsendurchmesser  $d$  einen möglichst großen Wert annehmen. Eine Obergrenze ist durch das begrenzte

Saugvermögen gegeben, da der Gasfluß aus der Düse proportional  $p_0 d^2$  ist. Daher empfiehlt sich die Wahl eines kleinen Düsendurchmessers bei großem Quellendruck. Eine 30µm-Düse erweist sich als guter Kompromiß für die Erzeugung der Heliumstrahlen.

Für die Krypton- und Xenonstrahlen ergibt sich eine zusätzliche Einschränkung: Bei der Expansion kann durch die starke Abkühlung Kondensation im Strahl auftreten, was zu Clusterbildung führt. Um dies zu vermeiden, wird für den Sekundärstrahl eine 200µm-Düse benutzt und ein Druck von 300 bis 500mbar eingestellt. Dadurch wird sichergestellt, daß der Anteil der Cluster im Strahl klein bleibt.

Eine Aufstellung der Strahldaten findet sich in Tabelle 4. Die Werte für die wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten und die Geschwindigkeitsverhältnisse werden mit einem Programm von D. Otten ermittelt, das eine Verteilung nach (3.1.4.) an die gemessenen Flugzeitverteilungen anpaßt.

### 3.2. Flugzeitanalysen

#### a) Vorbemerkungen zur Geschwindigkeitsmessung

Für die Auswertung der differentiellen Streuquerschnitte ist eine sorgfältige Geschwindigkeitsanalyse der verwendeten Strahlen aus zwei Gründen unerlässlich:

- (i) Aus den wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten ermittelt man die (wahrscheinlichste) Stoßenergie, die für den Vergleich mit berechneten Querschnitten möglichst genau bekannt sein muß.

- (ii) Aus den Breiten der Geschwindigkeitsverteilungen erhält man die Geschwindigkeitsverhältnisse, die als Parameter in die Mittelungsrechnungen (siehe Kapitel 5.2) eingehen, ohne die ein quantitativer Vergleich gemessener und gerechneter Wirkungsquerschnitte ebenfalls nicht möglich wäre.

Die Geschwindigkeit wird durch Flugzeitanalyse gemessen. Die Methode soll nur kurz vorgestellt werden, eine ausführliche Beschreibung findet sich bei [Huisken, 78], eine andere bei [Kesper, 87], in der auch die hier verwendete Meßelektronik und die Rechnersteuerung dargestellt wird. Zentraler Bestandteil des Aufbaus zur Flugzeitmethode ist der Chopper. Eine schnell rotierende Scheibe "zerschneidet" mit ihren Schlitzen den Atom- oder Molekülstrahl in einzelne Pakete. Die darin enthaltenen Teilchen werden dann infolge der Breite der Geschwindigkeitsverteilung zu verschiedenen Zeiten vom Detektor registriert.

Die einfachste Möglichkeit ist das Einzelpulsverfahren. Dabei werden die Ankunftszeiten von Teilchen, die von einem Schlitz des Choppers durchgelassen werden, in der zeitlichen Abfolge ihrer Ankunft registriert. Die Drehzahl des Choppers ist begrenzt durch die Forderung, daß zwei aufeinanderfolgende Strahlpakete sich nicht überlappen dürfen. Dadurch ergibt sich bei konstanter Schlitzbreite eine Obergrenze für die zeitliche Auflösung. Verringert man dagegen die Schlitzbreite, reduziert sich die Transmission. Für die pseudostatistische Flugzeitmethode gelten diese Einschränkungen nicht. Sie wird im folgenden Teil vorgestellt.

b) Pseudostatistische Modulation

Zunächst soll die Zeitabhängigkeit des Detektorsignals  $D(t)$  in einem Flugzeitexperiment mit Chopper betrachtet werden. Sie kann als Faltung der Flugzeitverteilung  $F(t)$  mit der Chopperdurchlaßfunktion  $C(t)$  dargestellt werden:

$$(3.2.1.) \quad D(t) = U + \int C(t-t'') F(t'') dt'' \quad .$$

Hierbei gibt  $U$  das Untergrundsignal an, das im Idealfall nicht zeitabhängig ist.  $C(t)$  beschreibt die Modulation des Strahls durch die Chopperscheibe. Sie kann Werte zwischen 0 (Strahl unterbrochen) und 1 (Strahl offen) annehmen. Um Gleichung (3.2.1.) eindeutig nach  $f(t)$  auflösen zu können, muß die Autokorrelation der Chopperfunktion die Dirac'sche Deltafunktion ergeben:

$$(3.2.2.) \quad \int C(t') C(t'+t) dt' = \delta(t) \quad .$$

Unter dieser Bedingung läßt sich die Flugzeitverteilung durch Kreuzkorrelation von  $C(t)$  und  $D(t)$  rekonstruieren:

$$(3.2.3.) \quad F(t) = \int C(t') D(t+t') dt' - U \int C(t') dt' \quad .$$

Die Realisierung im Experiment sieht nun folgendermaßen aus: Auf der Chopperscheibe sind zwei Sequenzen von Schlitten und Stegen eingeschnitten. Sie werden beschrieben durch die Folge  $S_k$ , die nur die diskreten Werte 0 und 1 annehmen kann. Sie besteht aus  $N=127$  Elementen der Breite  $\tau_{Ch}$ , die eine sogenannte pseudostatistische Folge bilden. Bei 64 Elementarschlitten



und 63 Stegen ergibt sich eine Transmission von etwa 50%. Sie bilden eine sogenannte pseudostatistische Folge. Das Charakteristikum einer solchen Folge ist ihre Autokorrelation. Diese ist eine konstante Funktion mit dreieckförmigen Spitzen der Breite  $\tau_{Ch}$  im Abstand  $N=N\tau$ , wodurch die in Gleichung (3.2.2.) geforderte Deltafunktion hinreichend gut angenähert wird. Das Detektorsignal wird im Vielkanalanalysator als diskretes Spektrum  $D_K$  gespeichert. Ein Zyklus des Einlesens in die Kanäle wird durch einen sogenannten Reset-Puls gestartet. Diesen liefert ein Fototransistor beim Durchgang eines Schlitzes auf der Chopperscheibe, der den Anfang jeder Sequenz markiert, durch eine Lichtschranke. Die Kanalbreite  $\tau_{VK}$  des Vielkanals ist gerade halb so groß wie die Öffnungszeit  $\tau_{Ch}$  des kleinsten Schlitzes. Bei einer Chopperfrequenz von 492.13 Hz ergibt sich  $\tau_{Ch}=8\mu s$  und  $\tau_{VK}=4\mu s$ . Für die Kreuzkorrelation muß daher die pseudostatistische Folge verdoppelt werden:

$$(3.2.4.) \quad S'_{2k-1} = S'_{2k} = S_k, \quad k = 1, 2, \dots, 127 \quad .$$

Man erhält das Flugzeitspektrum durch die Summation

$$(3.2.5.) \quad F_j = \sum_{k=1}^{254} S'_k D_{j-k}, \quad j = 1, 2, \dots, 254 \quad .$$

Die Vorteile gegenüber der Einzelpulsmethode sind zum einen die wesentlich höhere Transmission, weil das Überlappingsverbot umgangen werden kann, zum anderen die geringeren statistischen Fehler bei Messungen, wo der Untergrund pro Kanal größer als der Mittelwert des Flugzeitspektrums ist.

c) Eichung der Verzögerungszeiten

Zur exakten Bestimmung der Geschwindigkeiten im Strahl müssen die Flugzeiten geeicht werden, da die aus Gleichung (3.2.5.) gewonnenen Verteilungen über der Gesamtzeit  $t_{\text{TOF}}$ , der Zeit zwischen dem Resetpuls und dem Eintreffen der Signale am Vielkanalanalysator, aufgetragen sind. Diese Zeit läßt sich als Summe aus der "echten" Flugzeit und drei verschiedenen Verzögerungszeiten darstellen:

$$(3.2.6.) \quad t_{\text{TOF}} = t_{\text{FZ}} + t_{\text{Ion}} + t_{\text{Res}} + t_{\text{El}} .$$

Die Summanden sind im einzelnen

$t_{\text{FZ}}$ , die Flugzeit der Teilchen vom Chopper bis zum Ionisator (durchlaufene Strecke  $L = 484\text{mm}$ ),

$t_{\text{Ion}}$ , die Flugzeit der Ionen vom Ionisierungsvolumen bis zum Vervielfacher,

$t_{\text{Res}}$ , die Zeit vom Reset-Puls bis zum Durchgang des Anfangs einer pseudostatistischen Sequenz durch die Strahlachse, und

$t_{\text{El}}$ , die Laufzeit der Signale von Channeltron zum Vielkanalanalysator.

Da die elektronische Verzögerungszeit  $t_{\text{El}}$  unter  $1\mu\text{s}$  liegt, kann sie im Vergleich zu den anderen Fehlern vernachlässigt werden. Es müssen also nur die Ionenflugzeit und die Verzögerung des Reset-Pulses geeicht werden.

i) Eichung von  $t_{\text{Res}}$

Die Lichtschranke, die beim Anfang einer pseudostatistischen Sequenz den Reset-Puls zum Starten eines Meßzyklus liefert, ist gegenüber dem Durchgang des Strahls durch die Chopperscheibe um ca.  $60^\circ$  versetzt montiert. Zur genauen Erfassung dieser Verzögerung ist die Gesamtzeit  $t_{\text{TOF}}$  am Beispiel eines Neonstrahls (30  $\mu\text{m}$  Düse, 3bar Quellendruck) in Abb. 4 für verschiedene Kanalbreiten  $\tau_{\text{VK}}$  des Vielkanalanalysator aufgetragen. Die Punkte für  $\tau_{\text{VK}} = 3\mu\text{s}$  bis  $\tau_{\text{VK}} = 8\mu\text{s}$  liegen auf einer Geraden, aus deren Steigung sich

$$(3.2.7.) \quad t_{\text{Res}} = 87.2\mu\text{s} \cdot \tau_{\text{VK}}$$

ergibt. In dieser Gleichung ist auch schon eine mögliche Verzögerung im Vielkanalanalysator enthalten, die bei [Huisken und Pertsch, 87] mit einer Kanalbreite  $\tau_{\text{VK}}$  angegeben wird.

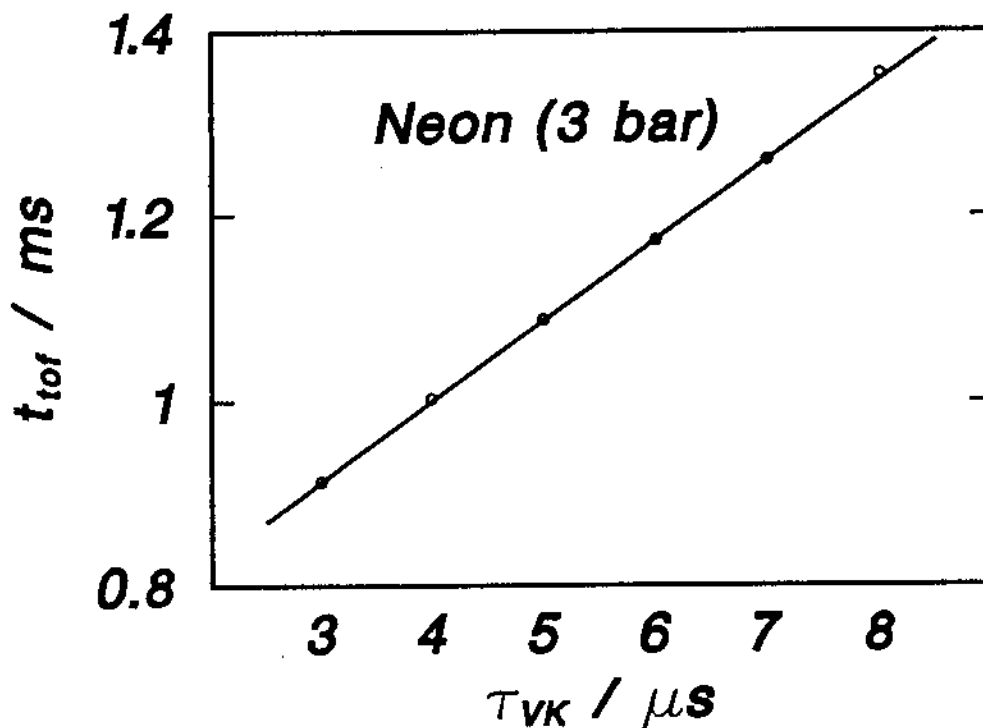


Abbildung 4: Eichung der Ionenflugzeit

Abhängigkeit der Gesamtflugzeit  $t_{\text{tof}}$  von der Nachweismasse  $M$  der verschiedenen Fragmente der  $\text{C}_2\text{H}_4$ -Cluster.

ii) Eichung von  $t_{\text{Ion}}$

Ein Summand in Gleichung (3.2.6.) ist die Ionenflugzeit in der Ionenquelle und im Quadrupolfeld. Sie hängt von den Potentialen der Ionenquelle ab und entzieht sich aufgrund der komplizierten Feldverteilung einer einfachen Berechnung. Eine einfache Methode der Eichung wird bei [Huiskens und Pertsch, 87] beschrieben. Flugzeitspektren eines Strahls aus 10%  $\text{C}_2\text{H}_4$  in Helium (30  $\mu\text{m}$  Düse, 5bar) werden auf den verschiedenen Massen  $M = 12, 13, 14, 27, 41, 56, 69, 82, 84$  amu aufgenommen. Die Nachweismassen entsprechen Fragmenten des Monomers und höherer Cluster. Unter der Annahme, daß alle vorkommenden Clustergrößen (jedoch nicht das Trägergas Helium) bis zur Ionenquelle eine einheitliche Geschwindigkeit haben, kann man aus den unterschiedlichen Flugzeiten direkt auf die Abhängigkeit der Ionenflugzeit von der Masse schließen. Abbildung 5 zeigt, daß bei Auftragung der Gesamtzeit  $t_{\text{TOF}}$  über  $M^{1/2}$  sich näherungsweise eine Gerade ergibt.

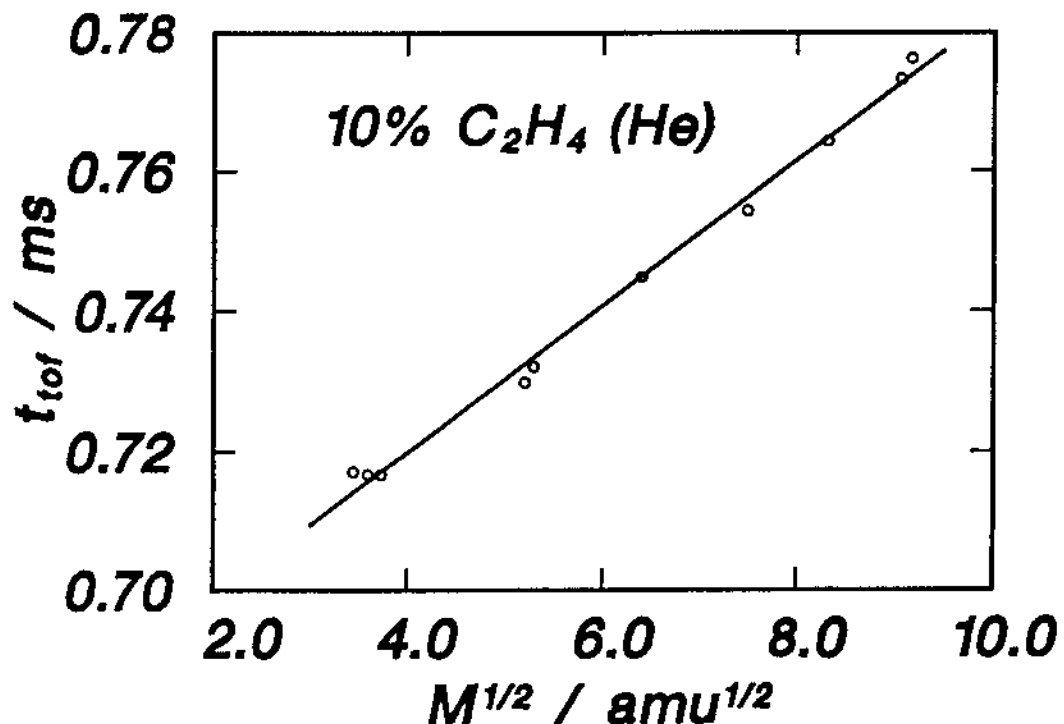


Abbildung 5: Eichung der Reset-Puls-Verzögerung

Abhängigkeit der Gesamtflugzeit  $t_{\text{tof}}$  von der Breite  $\tau_{\text{VK}}$  des Vielkanalanalysators.

Aus der Steigung folgt

$$(3.2.8.) \quad t_{\text{ION}} = 10.44 \mu\text{s} \cdot (M/\text{amu})^{1/2} .$$

Es darf nicht übersehen werden, daß der Wert der Steigung nicht eine Konstante der verwendeten Ionenquelle ist, sondern stark von den eingestellten Potentialen (siehe Tabelle 1) abhängt.

d) Auflösungsvermögen der Flugzeitmethode

Das Auflösungsvermögen der Apparatur für die Bestimmung von Flugzeiten  $t_{\text{FZ}}$  wird von den Unsicherheiten der Weg- und Zeitmessung bestimmt. Aus der Länge des Ionisationsvolumens  $\Delta L = 12\text{mm}$ , aus der Breite  $\tau_{\text{Ch}}$  eines Elementarschlitzes der Chopperscheibe und aus der Breite  $\tau_{\text{VK}}$  eines Kanals im Vielkanalanalysator ergibt sich

$$(3.2.9.) \quad \frac{\Delta t_{\text{App}}}{t_{\text{FZ}}} = \left[ \left( \frac{\Delta L}{L} \right)^2 + \left( \frac{\tau_{\text{Ch}}}{t_{\text{FZ}}} \right)^2 + \left( \frac{\tau_{\text{VK}}}{t_{\text{FZ}}} \right)^2 \right]^{1/2} .$$

Damit erhält man aus der Breite  $\Delta t_{\text{TOF}}$  der gemessenen Gesamtzeitverteilungen die Breite der wirklichen Flugzeitverteilungen im Strahl

$$(3.2.10.) \quad \frac{\Delta t_{\text{FZ}}}{t_{\text{FZ}}} = \left[ \left( \frac{\Delta t_{\text{TOF}}}{t_{\text{FZ}}} \right)^2 - \left( \frac{\Delta t_{\text{App}}}{t_{\text{FZ}}} \right)^2 \right]^{1/2} .$$

Aus dieser Breite werden die Geschwindigkeitsverhältnisse  $S$  nach Gleichung (3.1.5.) bestimmt.

Da die Länge des Ionisationsvolumens wegen des damit verbundenen Verlusts an Effizienz im Nachweis nicht verringert werden soll, bestimmt die maximal erreichbare Chopperdrehzahl die Geschwindigkeitsauflösung. Da der verwendete Choppermotor auf Dauer nicht mit mehr als 500 Hz betrieben werden kann, ergibt sich  $\tau_{VK} = 4\mu s$  bzw.  $\tau_{CH} = 8\mu s$  als Grenze. Durch Verwendung eines größeren Choppermotors oder einer Chopperscheibe mit mehr als zwei pseudostatistischen Sequenzen könnte die Auflösung verbessert werden, dem steht jedoch der geringe Platz in der Streukammer entgegen.

Typische Werte des Auflösungsvermögens für die verwendeten Strahlen sind in Tabelle 2 aufgelistet. Bei dem gegebenen Aufbau überwiegt bei schnellen Strahlen der Einfluß der Kanalbreite, bei langsameren Strahlen ( $\leq 1000 m/s$ ) begrenzt dagegen die Flugstreckenunsicherheit das Auflösungsvermögen.

Tabelle 2: Flugzeitauflösungsvermögen

Gas	$v_w/ms^{-1}$	$t_{FZ}/\mu s$	$\frac{\Delta L}{L}$	$\frac{\tau_{CH}}{t_{FZ}}$	$\frac{\tau_{VK}}{t_{FZ}}$	$\frac{\Delta t_{App}}{t_{FZ}}$
He	1801.5	269	2.5%	3.0%	1.5%	4.2%
He	1008.5	480	2.5%	1.7%	0,8%	3.1%
Kr	378.6	1278	2.5%	0.6%	0.3%	2.6%
Xe	308.7	1568	2.5%	0.5%	0.3%	2.5%

#### 4. Kreuzstrahlexperiment

##### 4.1. Messung von Winkelverteilungen

Bei den hier beschriebenen Streuexperimenten in einer Kreuzstrahlapparatur werden die Heliumatome des Primärstrahls im Überlappungsgebiet der beiden Strahlen, dem Streuvolumen, von den Targetatomen (Krypton, Xenon) des Sekundärstrahls abgelenkt. Die eigentliche Meßgröße ist die Winkelverteilung der gestreuten Heliumatome, die vom schwenkbaren Detektor auf der entsprechenden Masse nachgewiesen werden. Diese Verteilungen zeigen schon die typischen Strukturen des differentiellen Streuquerschnitts im Laborkoordinatensystem, sind jedoch mit diesem nicht identisch, da sie immer durch Mittelung über die im nichtidealen Experiment vorkommenden Winkel- und Geschwindigkeitsverteilungen der Strahlen und durch das Winkelauflösungsvermögen des Detektors nicht unwesentlich beeinflusst sind. Sie hängen außerdem noch von der Geometrie des Aufbaus, wie in Abschnitt 4.3. bis 4.6. beschrieben, ab. Erst wenn alle diese Einflüsse quantitativ bestimmt und dadurch einer Korrektur (Abschnitt 5.3c) zugänglich sind, kann ein Vergleich mit gerechneten Querschnitten erfolgen.

##### 4.2. Lock-In-Verfahren

Da die Nachweiswahrscheinlichkeit des Heliumatoms wegen des geringen Ionisationsquerschnitts und der hohen Geschwindigkeiten besonders klein ist und gleichzeitig das Untergrundsignal auf dieser Masse infolge der geringen Pumpleistung für Helium groß ist, ergeben sich trotz der nicht ungewöhnlich kleinen Werte der differentiellen Streuquerschnitte bis herab zu  $5\text{Å}^2\text{sr}^{-1}$  Probleme, ein hinreichend gutes Signal-Untergrund-Verhältnis zu erzielen. Im Hinblick darauf wäre es bei weitem günstiger, Krypton oder Xenon

nachzuweisen, jedoch würden für diesen Fall die Oszillationen des Querschnitts im Laborsystem unauflösbar eng beinanderliegen.

Daher kommt hier die phasenempfindliche Verstärkung ("Lock-In"), ein überall in der Meßtechnik gebräuchliches Verfahren zur Untergrundreduzierung bei kleinen Signalen, zur Anwendung. Die Methode wird hier durch einen Chopper realisiert, dessen Scheibe mit 32Hz rotiert und die auf einem Winkelsegment von 180° den Sekundärstrahl zwischen Düse und Skimmer unterbricht. Ein von D. Otten entwickeltes Meßprogramm für digitales Lock-In (DLI) ermöglicht das zeitlich abwechselnde Zählen der vorverstärkten Channeltron-Pulse in zwei Kanäle. Die beiden Kanäle entsprechen dem Detektorsignal mit und ohne Sekundärstrahl. Zwischen dem Eintreffen der Signale von einer Lichtschranke am Chopper und dem Wechsel der beiden Kanäle ist eine gewisse Verzögerungszeit erforderlich, weil die Lichtschranke gegenüber dem Durchgang des Molekülstrahls durch die Chopperscheibe um 120° versetzt montiert ist. Im Vergleich dazu kann der Anteil der Flugzeit an der Verzögerungszeit vernachlässigt werden. Die Zählrate in einem Kanal entspricht somit der Summe aus Untergrundsignal  $U$  und Streusignal  $S$ , die Zählrate im anderen Kanal ist das Untergrundsignal. Durch Bilden der Differenz erhält man das Streusignal allein. Das DLI-Programm, das auf einem Experimentrechner vom Typ Micro-PDP 11/23 läuft, bewerkstelligt dies mit Hilfe mehrerer Uhren und Zähler, die als CAMAC-Einschübe ausgelegt sind. Eine sehr detaillierte Beschreibung ihrer Schaltung und der FORTRAN-Programme findet sich bei [Kesper, 87].

Während eines Meßzyklus (hier 500 Chopperumdrehungen) werden die Signale  $S+U$  und  $U$  in den beiden Zählern aufaddiert und anschließend vom Meßprogramm ausgelesen. Nach Durchführen von  $N$  Meßzyklen werden die arithmetischen Mittelwerte  $\bar{S}$  und  $\bar{U}$  gebildet. Die Streusignale liegen in der Größenordnung von 10Hz bis hinauf zu einigen kHz im Kleinwinkelbereich. Die Standardabweichung des Streusignals wird definiert zu



$$(4.2.1.) \quad \sigma_s = \left[ \frac{1}{i(i-1)} \sum_{i=1}^N (S_i - \bar{S})^2 \right]^{1/2} .$$

Typischerweise liegt die Anzahl der Meßzyklen zwischen 5 und 100, die Meßzeiten für einen Winkel liegen zwischen etwa einer Minute (bei 4° Detektorwinkel) und 15 Minuten (bei 40°). Dadurch werden bei Signal-Untergrundverhältnissen von 100% bis 1% Standardabweichungen von einigen Promille bis etwa 10% erreicht. Eine weitere Verbesserung der Statistik durch Verlängerung der Meßzeiten, die ohnehin schon bei 16 Stunden pro Winkelverteilung liegen, erscheint wegen der hohen Kosten der schweren Edelgase nicht sinnvoll.

Während einer Messung wird die Winkelsteuerung des Detektors von einem von G. Hoffmann geschriebenen Programmteil übernommen. Bis zu fünf Winkelbereiche können vorprogrammiert werden, für die einzeln Startwinkel, Endwinkel, Winkelinkrement und Meßzeit eingegeben werden. Um längerfristige Schwankungen der Intensität erkennen zu können, kann die automatische Winkelsteuerung in wählbaren Zeitintervallen immer wieder die Intensität auf einem Referenzwinkel messen. Solche Referenzmessungen, die ein- bis zweimal pro Stunde bei einem Maximum in der Gegend von 10° erfolgen, zeigen Schwankungen in der Intensität von einigen Prozent auf, jedoch waren keine Langzeitdrifts zu erkennen, die numerisch korrigiert werden müßten.

Für beide Stoßsysteme werden Winkelverteilungen bei zwei verschiedenen Energien aufgenommen: Bei den Messungen mit Schwerpunktsenergien um 65meV sind beide Strahlquellen auf Raumtemperatur, bei den Messungen um 25meV ist die Heliumstrahlquelle mit flüssigem Stickstoff gekühlt. Zur Kontrolle der Geschwindigkeiten werden vor und nach jeder Winkelverteilung Flugzeitmessungen des Primärstrahls durchgeführt.

#### 4.3. Nullpunktskorrektur

Da die genaue Kenntnis des Streuwinkels wichtigste Voraussetzung für Auswertung von Oszillationen der Winkelverteilung ist, muß besondere Sorgfalt auf die Winkeljustierung verwandt werden. Dazu wird zunächst ein dünner Draht auf der Drehachse des Detektors durch die Streukammerkuppel gespannt. Bei Detektorwinkel  $\theta=0^\circ$  werden mit Hilfe eines Fernrohrs die Kollimationsblende und der Skimmer auf die Achse Detektoreingang-Draht einjustiert. Später wird der Ofen mit Hilfe der Verschiebeanordnung so verschoben, daß die Intensität des Signals vom direkten Strahl optimiert wird. Dazu wird eine Blende mit 20µm Durchmesser in die Öffnung des Segmentventils eingesetzt, um einen zu großen Gasanfall im Detektor zu vermeiden.

Zur Kontrolle, ob Primärstrahlachse und Justierachse zusammenfallen, wird nach jeder Messung einer Winkelverteilung die Intensitätsverteilung des Primärstrahls gemessen. Aus der Lage ihres Maximums,  $\theta_{\text{Prim}}$ , erhält man als Zusammenhang zwischen Streuwinkel  $\theta_0$  und Detektorwinkel  $\theta$

$$(4.3.1.) \quad \theta_0 = \theta - \theta_{\text{Prim}}$$

Typische Werte für  $\theta_{\text{Prim}}$  liegen im Intervall  $[-0.25^\circ, +0.25^\circ]$ .

Noch genauer könnte der Nullpunkt der Winkelskala geeicht werden, wenn wenigstens ein Teil der Winkelverteilung auch bei negativen Laborwinkeln gemessen wird. Aus der Forderung der Symmetrie der Verteilung nach Transformation ins Schwerpunktssystem könnte  $\theta_{\text{Prim}}$  sehr genau bestimmt werden [Schleusener, 78]. Diese Methode kann hier nicht angewandt werden, da der Detektor nur bis  $-3^\circ$  geschwenkt werden kann.

#### 4.4. Streugeometrie

Die in Abschnitt 5 dargestellten Methoden zur Simulation von Winkelverteilungen setzen unter anderem eine genaue Kenntnis der Streugeometrie voraus. Insbesondere das Winkelauflösungsvermögen ist, wie noch gezeigt wird, wesentlich von den Strahldivergenzen abhängig. Die geometrische Anordnung der Strahlquellen, Skimmer und Blenden und die Form des Streuvolumens ist in Abb. 6 zu sehen. Wichtige Abmessungen der Anordnung sind in Tabelle 3 zu finden. Die schon in Abschnitt 2.2b erwähnte Asymmetrie der beiden Strahlen fällt unmittelbar auf: Die Sekundärstrahlquelle liegt viel näher am Streuzentrum, da in der Streukammer primärseitig noch der Flugzeitchopper und eine Kollimationsblende untergebracht sind. Dadurch ist die Sekundärstrahldivergenz vom Düse-Skimmer-Abstand bestimmt, während die Divergenz des Primärstrahls durch den Abstand vom Skimmer zur Blende und die Durchmesser ihrer Öffnungen festgelegt wird. Die abgebildeten Düse-Skimmer-Abstände entsprechen denen, die während der Helium-Xenon-Experimente eingestellt waren. Die Werte auch für die anderen Messungen und die sich daraus ergebenden Winkeldivergenzen finden sich in Tabelle 4. Die Strahldivergenzen sind so gewählt, daß das Streuvolumen den ganzen vom Detektor einsehbaren Bereich ausnutzt. Eine Erhöhung der Winkelauflösung durch weitere Einschnürung der Strahlen mit Hilfe kleinerer Skimmer oder Blenden hätte die Streusignale zu klein werden lassen.

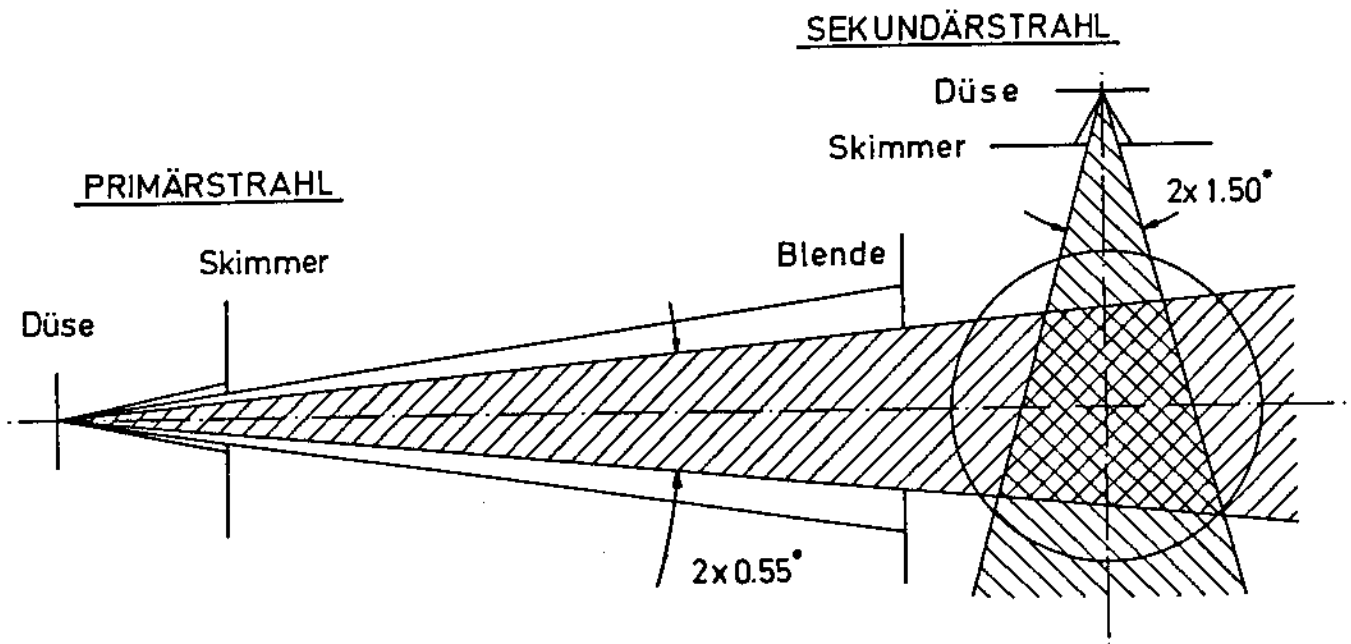


Abbildung 6: Streugeometrie

Die Strahlen sind in der Querdimension um einen Faktor 10 überhöht dargestellt. Der Kreis um das Streuzentrum entspricht der Region, die vom Detektor von allen Winkeln aus eingesehen werden kann.

Tabelle 3: Abmessungen der Apparatur (Alle Angaben in mm)

	Primärstrahl	Sekundärstrahl
Durchmesser:		
Skimmer:	0.78	0.63
Kollimationsblende:	3.2	--
Abstand vom Streuzentrum:		
Skimmeröffnung:	184	55
Kollimationsblende:	42	--
Bei He-Xe-Messung:		
Düse-Skimmer-Abstand:	35	12
Winkeldivergenz:	$1.1^\circ$	$3^\circ$
Breite des Strahls beim Streuzentrum:	2.1	1.8

#### 4.5. Einfluß von Restgas in der Streukammer

Erste Vergleiche der gemessenen Winkelverteilungen für die Systeme He-Kr und He-Xe mit entsprechenden, anhand von recht gut bekannten Potentialen aus Literaturangaben durchgeführten Berechnungen zeigen, daß die experimentellen Winkelverteilungen zu großen Streuwinkeln hin steiler abfallen als die simulierten Verteilungen. Dieser Effekt ist weit stärker bei den He-Kr-Messungen, wo der intensive Sekundärstrahl (500mbar, 200µm) aufgrund des kurzen Düse-Skimmer-Abstands von 6mm zu hohem Gasanfall in der Streukammer führt (Diese Einstellung, die auch eine große Strahldivergenz zur Folge hat, war wegen der geringen Intensität des Streusignals notwendig). Daher liegt die Vermutung nahe, daß Restgasstreuung in der Streukammer diesen Effekt verursacht. Aus der für größere Streuwinkel zunehmenden Abschwächung kann geschlossen werden, daß sich um den Sekundärstrahl herum eine Zone größerer Teilchenzahldichte ausbildet. Unter der Annahme, daß der Weg durch diese Zone (in erster Näherung) linear mit dem Streuwinkel wächst, erhält man für die Abschwächung der Intensität

$$(4.5.1.) \quad I(\theta) \sim 10^{-K\theta}$$

Diese Erscheinung ist vermutlich eine Folge der kleinen Streukammerkonstruktion, in der der Gasanfall durch die intensiven Strahlen sich auf wenig Volumen verteilt. Möglicherweise läßt sich das Problem durch Einbau mit flüssigem Stickstoff gekühlter Oberflächen lösen.

Zur Eichung des Korrektorexponenten K für die He-Kr-Messung wird unter vergleichbaren Bedingungen eine He-Ne-Winkelverteilung aufgenommen. Aus dem für dieses System gut bekannten Potential [Schleusener, 78] wird eine Winkelverteilung simuliert. Durch Vergleich der gemessenen und berechneten

Intensitäten kann die Abhängigkeit nach Gleichung (4.5.1.) bestätigt werden und die Größe von K abgeschätzt werden. Die genauen Werte werden dann durch Vergleich gerechneter und gemessener He-Kr-Verteilungen ermittelt:

$$K = 1.09 \text{ rad}^{-1} \quad (25.08 \text{ meV})$$

$$K = 1.20 \text{ rad}^{-1} \quad (65.29 \text{ meV})$$

Bei den He-Xe-Messungen konnte aufgrund des günstigeren Signal-Untergrund-Verhältnisses ein Düse-Skimmer-Abstand von 12mm eingestellt werden. Zur Festsetzung der hier weit schwächeren Korrektur werden zusätzlich bei 6, 15, 20 mm einige Punkte in drei aufeinanderfolgenden Maxima gemessen: Es zeigt sich, daß bereits von 15mm an keine Korrektur mehr erforderlich ist. Für die Messungen bei 12mm erhält man für den Exponenten:

$$K = 0.34 \text{ rad}^{-1} \quad (22.35 \text{ meV})$$

$$K = 0.52 \text{ rad}^{-1} \quad (67.20 \text{ meV})$$

Dieses Ergebnis wird durch Vergleich mit gerechneten Verteilungen bestätigt, wie Abbildung 7 zeigt.

Der Vergleich mit einer Winkelverteilung, die aus einem der in der Literatur gefundenen Potentiale berechnet worden ist, ist gerechtfertigt, da die Potentiale sich in der Topftiefe nur geringfügig unterscheiden und daher die differentiellen Streuquerschnitte im generellen Verlauf der Amplituden der Maxima nur unmerklich voneinander abweichen. Darüber hinaus wird das exponentielle Abfallen der Querschnitte ohnehin nicht zur Bestimmung der Topftiefe herangezogen.

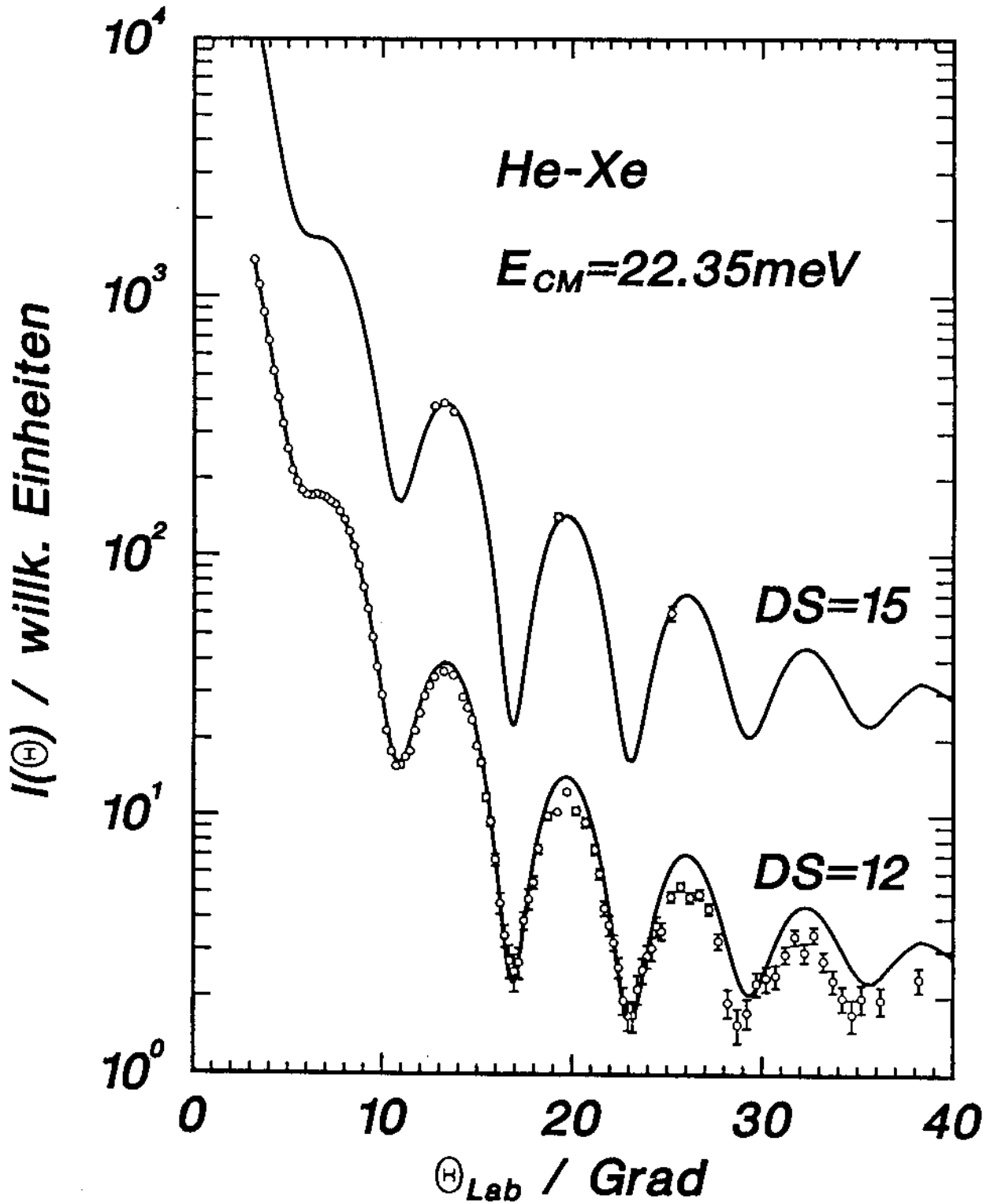


Abbildung 7: Restgasstreuung

Abhängigkeit der gemessenen Winkelverteilungen vom Gasanfall in der Streukammer. Bei einem Düse-Skimmer-Abstand von 12mm fallen die gemessenen Werte zu stark ab, bereits bei 15mm ist dies nicht mehr der Fall.

#### 4.6. Streuolumenkorrektur

In Abbildung 8 ist schematisch der Aufbau des Detektors dargestellt. Nur die Blenden und Röhrchen, die einen Einfluß auf die Detektoreinsicht haben könnten, sind eingezeichnet. Als strahlbegrenzend erweisen sich das Röhrchen, das vom Segmentventil in die Streukammer ragt, und die Eingangsblende der Ionenquelle. Aus dem Detektorakzeptanzwinkel von  $1.51^\circ$  ergibt sich eine gedachte Kugel von 6.5mm Durchmesser um das Streuzentrum herum, von der aus Teilchen geradlinig in den Ionisator gelangen können. Ein horizontaler Schnitt dieser Kugel ist auch in Abb. 6, die sich auf die Anordnung bei der Helium-Xenon-Messung bezieht, zu sehen. Von allen Detektorwinkeln aus wird das ganze Streuvolumen eingesehen, eine Korrektur ist also nicht erforderlich.

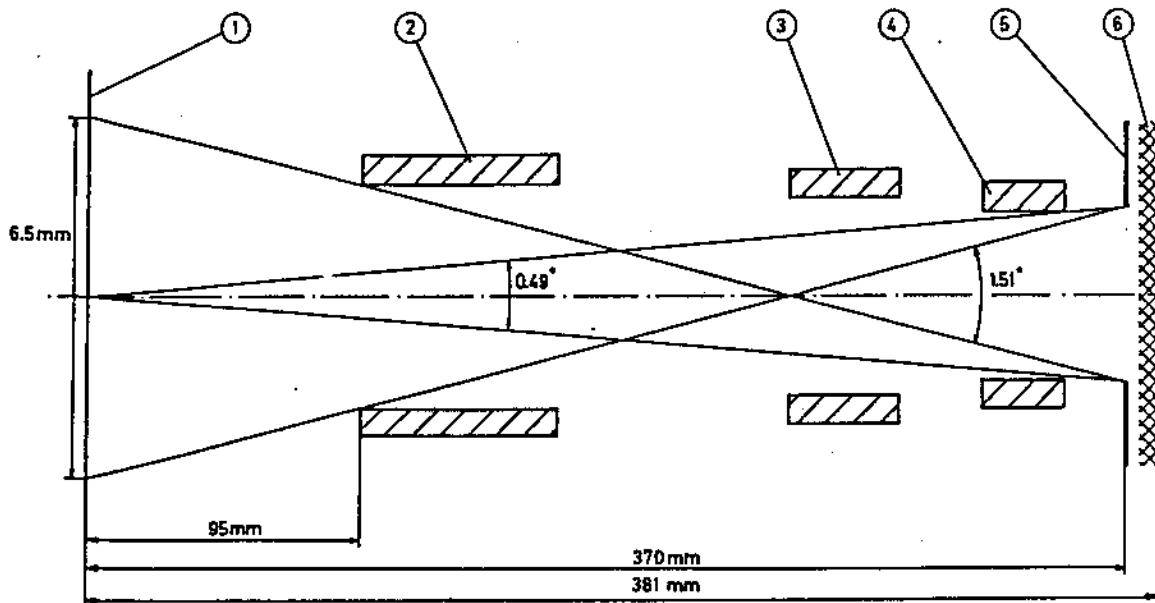


Abbildung 8: Detektorgeometrie

Die Querdimension ist um einen Faktor 20 überhöht.

- 1) Streuzentrum
- 2) Röhrchen zur Begrenzung der Detektoreinsicht:  
4mm Innendurchmesser, 43mm Länge
- 3) Leitwtröhrchen vor Detektorhauptkammer:  
35mm Innendurchmesser, 40mm Länge
- 4) Leitwtröhrchen vor Ionisatorkammer:  
3mm Innendurchmesser, 30mm Länge
- 5) Eintrittsblende der Ionenquelle  
3.16mm Durchmesser
- 6) Ionisationsvolumen  
12mm Länge



Bei den Helium-Krypton-Experimenten mußte, wie schon in Abschnitt 4.5. erwähnt, sekundärseitig ein Düse-Skimmer-Abstand von 6mm eingestellt werden. Dadurch ergibt sich ein Streuvolumen, das in Primärstrahlrichtung doppelt so lang ist und das zwar bei Detektorwinkel  $\theta=0^\circ$  noch ganz, mit zunehmendem  $\theta$  aber zu einem immer geringeren Teil eingesehen werden kann. Da die erforderliche Korrektur aber um mindestens eine Größenordnung kleiner ist als die Intensitätskorrektur aufgrund der Restgasstreuung und darüber hinaus eine ähnliche Winkelabhängigkeit hat, wird sie nicht gesondert durchgeführt, sondern ist in der Intensitätskorrektur enthalten.

## 5. Bestimmung des Wechselwirkungspotentials

Ziel der Auswertung der differentiellen Streuquerschnitte ist die Bestimmung des zugrundeliegenden Wechselwirkungspotentials. Prinzipiell erhält man auch aus makroskopischen Eigenschaften von Gasmischungen, wie etwa der Abhängigkeit des zweiten Virialkoeffizienten von der Temperatur oder den Transporteigenschaften (Viskosität, Wärmeleitung, Diffusion) Informationen über die Wechselwirkung, jedoch sind sie außer bei tiefen Temperaturen nicht empfindlich auf den Bereich der Potentialmulde, die bei der Wechselwirkung von Helium mit den schweren Edelgasen besonders flach ist (etwa 2.5meV).

In dieser Arbeit werden daher außer den gemessenen Streuquerschnitten nur noch Messungen des zweiten Virialkoeffizienten berücksichtigt, da diese auch bei tiefen Temperaturen (um 100K) vorliegen. Wie in Abschnitt 6 noch im einzelnen gezeigt wird, sind die differentiellen Streuquerschnitte, obwohl die Stoßenergie bei den hier beschriebenen Experimenten etwa 10 bzw. 30 mal größer als die Tiefe des Potentialtopfs ist, außerordentlich empfindlich auf Details im Bereich der Mulde und sind damit die bei weitem präziseste Meßgröße zur Potentialbestimmung. Um jedoch bei der Anpassung von Potentialen sicher zu gehen, daß auch der repulsive Teil richtig wiedergegeben wird, empfiehlt sich auch die Berechnung von Virialkoeffizienten, da diese den ansteigenden Teil bis in größere Höhen abtasten als die Steuquerschnitte bei den vorliegenden Stoßenergien.

Im folgenden werden die Methoden beschrieben, mit denen zu gegebenem Potential die Wirkungsquerschnitte (Abschnitt 5.1. bis 5.3.) und die zweiten Virialkoeffizienten (Abschnitt 5.4.) berechnet werden, um so einen Vergleich mit den Messungen der beiden Größen und gegebenenfalls eine Anpassung des Potentials zu ermöglichen.

### 5.1. Untersuchung der Mittelungseinflüsse bei differentiellen Streuquerschnitten

In diesem Abschnitt soll der Zusammenhang zwischen den Winkelverteilungen der gestreuten Teilchen, die, wie in Abschnitt 4.1. besprochen, gemessen werden können, und dem differentiellen Streuquerschnitt im Schwerpunktskoordinatensystem  $d\sigma/d\omega$  hergestellt. Letzterer ist zum einen frei von Einflüssen des Experiments, zum anderen kann er mit quantenmechanischen Rechenverfahren aus dem Wechselwirkungspotential abgeleitet werden. Hier wird durch rechnerische Simulation der in einem realen Kreuzstrahlexperiment auftretenden Mittelung aus einem differentiellen Streuquerschnitt, der aus einem vorgegebenen Potential berechnet wird, die Winkelverteilung hergeleitet, wobei die Winkel- und Geschwindigkeitsverteilungen der beiden Strahlen berücksichtigt werden.

Der umgekehrte Weg ist nur in wenigen Fällen möglich. Als Beispiel für die Anwendung eines semiklassischen Inversionsverfahrens sei hier auf die sehr genaue Potentialbestimmung für das System Argon-Krypton hingewiesen [Buck et al., 78]. Aus den Regenbogen- und den überlagerten Diffraktionsoszillationen des differentiellen Streuquerschnitts sowie den Glorienoszillationen des integralen Querschnitts konnte die klassische Ablenkfunktion rekonstruiert werden. Da bei den hier untersuchten Systemen aufgrund der geringen Tiefe des Potentialtopfes keine aufgelösten Regenbogenstrukturen im differentiellen Streuquerschnitt auftauchen und keine integralen Querschnitte mit Glorienmaxima vorliegen, kann dieser Weg hier nicht beschritten werden. Eine andere Methode wurde beim System He-Ne angewendet [Gerber et al., 78]. Eine gemessene Winkelverteilung, die nur Diffraktionsoszillationen aufweist, konnte entfaltet werden, und durch sehr komplexe Rechenverfahren konnte aus dem so von Mittelungseinflüssen befreiten

Streuquerschnitt das Potential gewonnen werden. Dieses Verfahren ist sehr aufwendig und stellt hohe Anforderungen an die Qualität der Meßdaten.

Einen Eindruck vom drastischen Effekt der Mittelungseinflüsse soll Abb. 9 vermitteln. Als Beispiel ist dort der aus dem in Kapitel 6 gefundenen Wechselwirkungspotential für das System Helium-Xenon berechnete ungemittelte Querschnitt zusammen mit dem gemittelten zum Vergleich aufgetragen. Vor allem fällt auf, daß die extrem spitzen Minima, die bis zu 3 Zehnerpotenzen tief sind (logarithmische Ordinate!), durch die Mittelung wesentlich flacher werden. Dagegen werden die Maxima, deren Struktur größer als das Winkelauflösungsvermögen ist, kaum beeinflusst.

Bei der nachfolgenden Herleitung wird nur der Spezialfall elastischer Streuung an kugelsymmetrischen Potentialen berücksichtigt. Dabei werden folgende Symbole zur Darstellung der Größen im Labor- bzw. Schwerpunktskoordinatensystem verwendet:

	Lab-System	CM-System
Geschwindigkeit vor dem Stoß	$\vec{v}_1, \vec{v}_2$	$\vec{u}_1, \vec{u}_2$
Geschwindigkeit nach dem Stoß	$\vec{v}_1^f, \vec{v}_2^f$	$\vec{u}_1^f, \vec{u}_2^f$
Streuwinkel	$\theta$	$\theta$
Raumwinkelement	$d\Omega$	$d\omega$
diff. Streuquerschnitt	$d\sigma/d\Omega$	$d\sigma/d\omega$
Massen	$m_1, m_2$	

Die Indices 1 und 2 bezeichnen den Primär- bzw. Sekundärstrahl. Der Zusammenhang zwischen den Geschwindigkeiten in den beiden Koordinatensystemen sowie die Streukinematik sind für ein Beispiel (Helium-Xenon,  $E_{CM} = 22.35\text{meV}$ ) in Abb. 10, einem Newton-Diagramm, veranschaulicht.

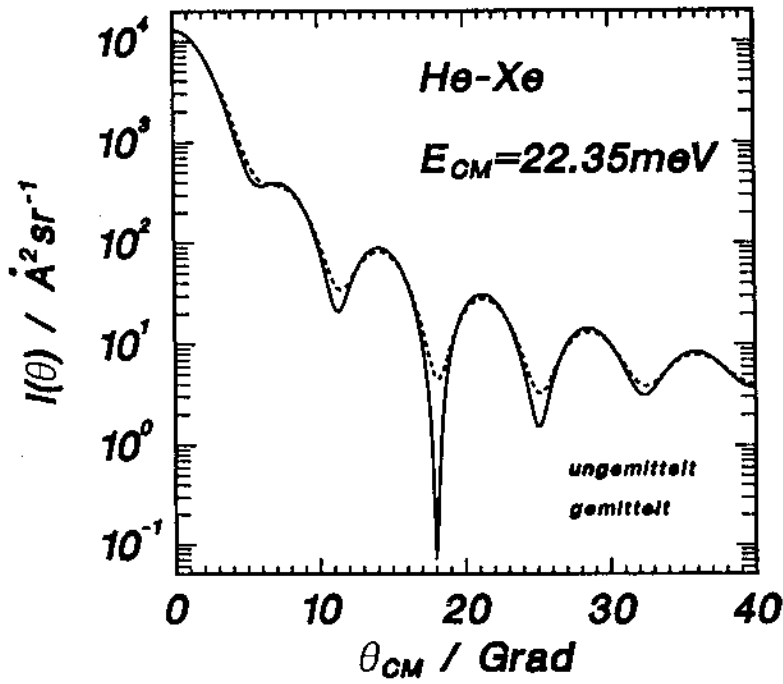


Abbildung 9: Effekt der Mittelung

Vergleich des ungemittelten mit dem gemittelten Streuquerschnitt im Schwerpunktsystem. Die Werte der Mittelungsparameter finden sich in Tabelle 5.

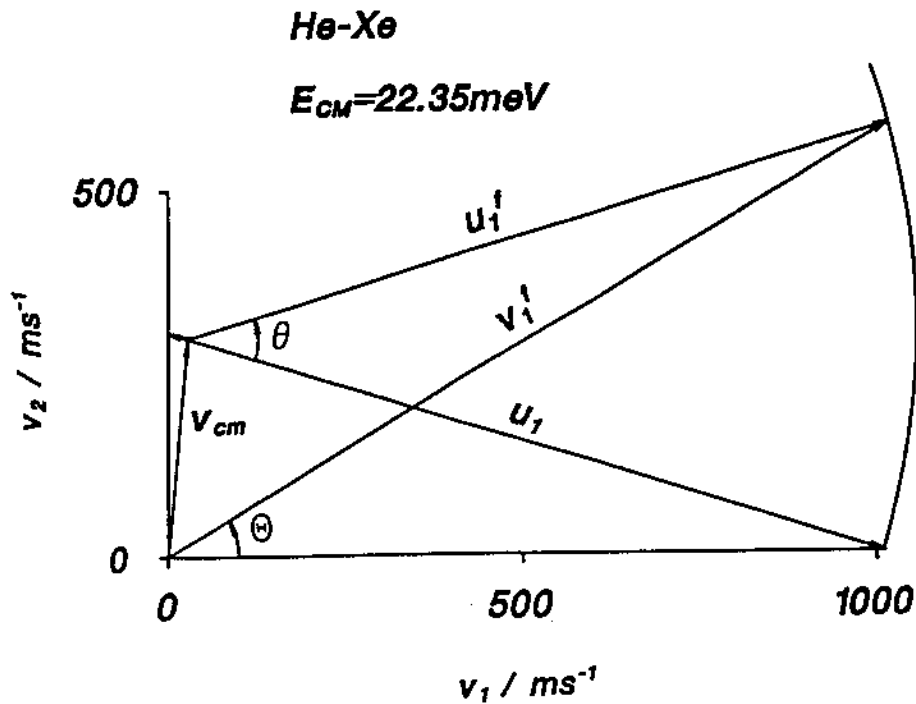


Abbildung 10: Newton-Diagramm für den elastischen Stoß

Der Kreis stellt die Punkte im Geschwindigkeitsraum dar, auf denen sich die Primärstrahlteilchen (Helium) nach dem Stoß befinden.

Zunächst soll die Streuung eines Primärstrahlteilchens betrachtet werden. Unter der Annahme, daß die Teilchenzahldichte der Targetatome im Sekundärstrahl gering ist, wird jedes Teilchen nur einmal gestreut. Durch Separation der Schwerpunktsbewegung

$$(5.1.1.) \quad \vec{v}_{CM} = \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2}$$

kann man zur Beschreibung im CM-System übergehen. Als zugehörige Geschwindigkeiten erhält man

$$(5.1.2.) \quad \vec{u}_i = \vec{v}_i - \vec{v}_{CM}, \quad i = 1, 2 .$$

Mit der Relativgeschwindigkeit

$$(5.1.3.) \quad \vec{g} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$$

erhält man die Stoßenergie im CM-System

$$(5.1.4.) \quad E_{CM} = \frac{\mu}{2} g^2 ,$$

wobei  $\mu$  die reduzierte Masse darstellt

$$(5.1.5.) \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} .$$

Aus Impuls- und Energieerhaltung folgt, daß sich die Geschwindigkeiten  $\vec{u}_1$  und  $\vec{u}_2$  dem Betrag nach nicht ändern, sondern beim Stoß nur um einen Winkel

$$(5.1.6.) \quad \theta = \arccos \frac{\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_1^f}{u_1^2}$$

gedreht werden. Die Wahrscheinlichkeit für die Ablenkung in ein Raumwinkel-element  $d\omega$  gibt der differentielle Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\omega$  ( $g, \theta$ ) an. Multiplikation mit dem Jacobi-Faktor führt zum Querschnitt im Laborsystem

$$(5.1.7.) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\omega} \cdot \frac{d\omega}{d\Omega} .$$

Bei der Koordinatentransformation gibt der Jacobi-Faktor das Verhältnis der Größe der Raumwinkelemente in beiden Koordinatensystemen an [Helbing, 67]

$$(5.1.8.) \quad \frac{d\omega}{d\Omega} = \left( \frac{v_1^f}{u_1^f} \right)^2 \cos^{-1} (u_1^f, v_1^f) .$$

Zur numerischen Erfassung eines realen Streuexperiments, bei dem eine sehr große Zahl von Einzelstößen auftritt, geht man zur Beschreibung durch die Teilchenzahldichten  $n_i$  der beiden Strahlen über, die im allgemeinen orts- und geschwindigkeitsabhängig sein können. Aus der einfachen Formel für die in einem Volumen  $\Delta V$  pro Zeiteinheit gestreuten Teilchen

$$(5.1.9.) \quad N = n_1 n_2 g \sigma \Delta V ,$$

wobei  $\sigma$  hier den integralen Streuquerschnitt bezeichnet, kann durch Verallgemeinerung die Beziehung für die Winkelverteilung der gestreuten Teilchen hergeleitet werden

$$(5.1.10.) \quad I(\theta_0) = \int_{\Delta \vec{v}_1} d\vec{v}_1 \int_{\Delta \vec{v}_2} d\vec{v}_2 \int_{\Delta V} d\vec{r} \int_{\Delta \Omega_D} d\Omega$$

$$n_1(\vec{v}_1, \vec{r}) n_2(\vec{v}_2, \vec{r}) g(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \frac{d\sigma}{d\omega} [g, \theta(\vec{v}_1, \vec{v}_2, \theta)] \frac{d\omega}{d\Omega} (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \theta) .$$

Die vorkommenden Integrationsvariablen und ihre Bereiche bedeuten:

- i)  $\int_{\Delta \vec{v}_1} d\vec{v}_1$ : Integration im Geschwindigkeitsraum des i-ten Strahls über alle im Strahl vorkommenden Geschwindigkeiten  $\vec{v}_1$ ,
- ii)  $\int_{\Delta V} d\vec{r}$ : Integration über das Streuvolumen  $\Delta V$ , den Bereich, wo  $n_1$  und  $n_2$  beide nicht verschwinden,
- iii)  $\int_{\Delta \Omega_D} d\Omega$ : Integration über den Raumwinkel  $\Delta \Omega_D$ , unter dem vom Ort  $\vec{r}$  im Streuvolumen aus der Detektor gesehen wird.

Die so zu berechnenden Intensitäten sind den im Experiment erhaltenen Winkelverteilungen proportional und erlauben einen direkten Vergleich.

Die Lösung eines solchen 11-fachen Integrals wäre numerisch sehr aufwendig, insbesondere dann, wenn sie bei einer Potentialanpassung für jeden Querschnitt und für jeden Punkt einer Winkelverteilung von neuem durchgeführt werden müßte. Daher ist es erforderlich, durch geeignete Näherungen die Dimension des Integrals zu erniedrigen, was den Rechenaufwand drastisch reduziert. Hier wird nach der von R. Düren entwickelten Methode vorgegangen [Düren, 75]. Als wesentliche Vereinfachung wird dort vorgeschlagen, die Integration über das Streuvolumen und den Raumwinkel des Detektors auszulassen, wenn die Größen im Integranden für die verschiedenen Stoßorte



innerhalb des Streuvolumens und für die verschiedenen Nachweissorte bei festem Detektorwinkel  $\theta_0$  annähernd konstant sind. Diese Näherung ist immer dann zutreffend, wenn folgende drei Bedingungen erfüllt sind:

- i) Der Abstand vom Streuvolumen zum Detektor muß wesentlich größer als die Abmessungen des Streuvolumens sein.
- ii) Der Jacobi-Faktor  $d\omega/d\Omega$  und der differentielle Streuquerschnitt  $d\sigma/d\omega$  dürfen sich für kleine Variationen von  $\vec{r}$  bzw.  $\theta$  nicht stark verändern.
- iii) Die Teilchenzahldichten  $n_i$  müssen innerhalb des Streuvolumens konstant sein. Dies ist hier in guter Näherung der Fall, da die Strahldivergenzen einen Wert von  $6^\circ$  nie überschreiten.

Als nächsten Schritt schlägt der Autor die Integration über die Schwerpunktsvariablen  $g$  und  $\theta$  vor, da der differentielle Streuquerschnitt eine Funktion dieser beiden Variablen ist:

$$(5.1.11.) \quad I(\theta_0) \sim \int_0^{+\infty} dg \int_0^\pi d\theta \frac{d\sigma}{d\omega}(g^*, \theta^*) \int_{\Delta\vec{v}_1} d\vec{v}_1 \int_{\Delta\vec{v}_2} d\vec{v}_2$$

$$\delta(g-g^*) \delta(\theta-\theta^*) n_1(\vec{v}_1) n_2(\vec{v}_2) g^* \frac{d\omega}{d\Omega} .$$

Die beiden eingeschobenen Delta-Funktionen sollen sicherstellen, daß beim Integrieren nur diejenigen Punkte im  $(\vec{v}_1, \vec{v}_2, g, \theta)$ -Raum berücksichtigt werden, die den Zwängen des Newton-Diagramms und somit der Energie- und Impulserhaltung genügen:

- i)  $g^*$  ist die Relativgeschwindigkeit, die für gegebene Geschwindigkeiten  $\vec{v}_1$  und  $\vec{v}_2$  Gleichung (5.1.3.) erfüllt.
- ii)  $\theta^*$  ist der Winkel, der für vorgegebenes  $\vec{v}_1$  und  $\vec{v}_2$  die Gleichung (5.1.6.) erfüllt, wobei dort  $\vec{u}_1^f$  in der Richtung des Detektors, die durch den Winkel  $\theta_0$  beschrieben wird, anzunehmen ist.

Wie schon in Gleichung (5.1.11.) durch die Reihenfolge der Integrationen angedeutet, läßt sich die Integration über  $\vec{v}_1$  und  $\vec{v}_2$  abspalten

$$(5.1.12.) \quad I(\theta_0) \sim \int_0^\infty dg \int_0^\pi d\theta \frac{d\sigma}{d\omega}(g, \theta) F(g, \theta; \theta_0) .$$

Die sogenannte Apparaturmittelungsfunktion  $F(g, \theta; \theta_0)$  ist nach den oben eingeführten Näherungen nur noch von den Verteilungen der Absolutbeträge und Richtungen der Geschwindigkeiten in den sich kreuzenden Strahlen abhängig.

Die Separation dieser Funktion bringt zwei große Vorteile:

- i) Da sie unabhängig vom Streuquerschnitt ist, braucht die Apparaturmittelungsfunktion  $F$  für jeden Laborwinkel  $\theta_0$  nur einmal berechnet zu werden. Bei einer Anpassung durch Variation von Potentialparametern ist für jeden neuen Querschnitt  $d\sigma/d\omega$  nur noch die Durchführung der zweifachen Integration über  $g$  und  $\theta$  erforderlich.
- ii) Bei der Konzeption eines neuen Experiments kann die Funktion  $F$  und somit das Energie- und Winkelauflösungsvermögen aus den Strahldivergenzen und Geschwindigkeitsverhältnissen der verwendeten Strahlen (siehe Abschnitt 5.2.a) im voraus abgeschätzt werden.

Die Aufteilung der Integration findet ihre Entsprechung in der Struktur der beiden verwendeten Rechenprogramme: Ein Programm berechnet mit Integration nach der Monte-Carlo-Methode die Apparaturmittelungsfunktion. Es wird in Abschnitt 5.2.a beschrieben. Es wird für jedes Stoßsystem nur einmal für eine Reihe verschiedener Laborwinkel benutzt. Ein zweites Programm, das Anpassungsprogramm, dient zur Berechnung des differentiellen Streuquerschnitts, mittelt diesen gemäß Gleichung (5.1.12) und kann Potentialparameter so variieren, daß die Abweichung zu einer gemessenen Winkelverteilung minimiert wird. Es wird in Abschnitt 5.3. vorgestellt.

## 5.2. Die Apparaturmittelungsfunktion

### a) Berechnung der Apparaturmittelungsfunktion nach der Monte-Carlo-Methode

Ein FORTRAN-Programm zur Berechnung der Mittelungsfunktion ist bei [Düren, 75] ausführlich beschrieben, dort findet sich ein Flußdiagramm des Algorithmus sowie eine genaue Liste der Ein- und Ausgabedaten. Daher wird hier nur kurz das Prinzip der Rechnung dargestellt:

Zunächst werden die Teilchenzahldichten zerlegt:

$$(5.2.1.) \quad n_i(\vec{v}_i) \sim f_i(v_i) d_i \left( \frac{\vec{v}_i}{v_i} \right), \quad i = 1, 2 \quad .$$

Dabei entspricht  $f_i$  einer Geschwindigkeitsverteilung nach Gleichung (3.1.4.). Die Funktion  $d_i$  beschreibt die Richtungsabhängigkeit. Innerhalb eines gedachten Kegels in Richtung der Strahlachse, dessen Spitze bei der Düsenöffnung liegt und dessen Öffnungswinkel durch die Skimmeröffnung

festgelegt wird, sei  $d_1=1$ , außerhalb sei  $d_1=0$ . Somit ergibt sich für F ein 6-faches Integral

$$(5.2.2.) \quad F(g^*, \theta^*, \theta_0) \sim \int_{\Delta \vec{v}_1} d\vec{v}_1 \int_{\Delta \vec{v}_2} d\vec{v}_2$$

$$\delta(g-g^*) \delta(\theta-\theta^*) f(v_1) f(v_2) d\left(\frac{\vec{v}_1}{v_1}\right) d\left(\frac{\vec{v}_2}{v_2}\right) g \frac{d\omega}{d\Omega} ,$$

das nach dem Monto-Carlo-Verfahren gelöst werden kann. Dazu werden Punkte aus dem  $(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ -Raum folgendermaßen ausgewählt:

- i) Mit Hilfe eines Zufallszahlengenerators werden Einheitsvektoren ausgewählt, die innerhalb des durch  $d_1$  definierten Kegels liegen.
- ii) Diese Einheitsvektoren werden mit Beträgen multipliziert, die der Geschwindigkeitsverteilung  $f_1$  der verwendeten Strahlen entsprechen.

Für eine bestimmte Detektoreinstellung werden zu jedem der Punkte in der so simulierten  $(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ -Verteilung die Werte für die Schwerpunktskoordinaten  $g^*$  und  $\theta^*$  ermittelt, die mit einem Laborwinkel  $\theta_0$  konsistent sind. Die Punkte werden mit ihrem Gewicht  $g \cdot d\omega/d\Omega$  dann in ein Raster von  $60 \cdot 60$  Punkten als Verteilung in  $g^*$  und  $\theta^*$  aufsummiert. Um eine einigermaßen glatte Verteilung zu erhalten, werden jeweils zweitausendmal die Richtungen zufällig ausgewählt und die Geschwindigkeitsverteilungen durch je 20 Stützstellen angenähert. Es werden somit  $2000 \cdot 20 \cdot 20 = 800000$  Einzelstöße simuliert. Für die Berechnung von 9 Verteilungen für Laborwinkel von  $5^\circ$  bis  $45^\circ$  im Abstand von  $5^\circ$  wird auf einer Großrechenanlage vom Typ UNIVAC-SPERRY-1100/80 eine Rechenzeit von einer Stunde benötigt.

b) Diskussion der Ergebnisse

Die sich ergebenden Verteilungen weisen ungefähr ellipsenförmige Konturen auf, deren Achsen fast parallel zur  $g$ - und  $\theta$ -Achse liegen. Das Maximum fällt sehr genau mit den Werten  $\bar{g}$  und  $\bar{\theta}$  zusammen, die dem sogenannten wahrscheinlichsten Newton-Diagramm entsprechen, das sich ergibt, wenn man für  $\vec{v}_1$  und  $\vec{v}_2$  als Richtungen die Strahlachsen und als Beträge die wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten annimmt. Um über ein Maß für die Energie- und Winkelauflösung zu verfügen, werden die Halbwertsbreiten  $\Delta g$  und  $\Delta \theta$  eingeführt. Die Tabellen 4 und 5 enthalten unter anderem die Ein- und Ausgabewerte des Monte-Carlo-Programms. Folgende Abhängigkeiten der Mittelungsgrößen von den Strahleigenschaften sind zu erkennen:

- i)  $\Delta g/\bar{g}$  ist unabhängig vom Nachweisswinkel  $\theta_0$ . Der Wert für  $\Delta g/\bar{g}$  hängt im wesentlichen vom Geschwindigkeitsverhältnis des Primärstrahls ab, da er um einen Faktor 2 bis 6 schneller als der Sekundärstrahl ist. Auch Winkeldivergenzen können  $\Delta g/\bar{g}$  vergrößern.
- ii) Die Halbwertsbreite mit  $\Delta \theta = 2\sigma$  wird wesentlich von den Strahldivergenzen bestimmt. Aus dem Vergleich der Ergebnisse für He-Kr und He-Xe wird ersichtlich (die Werte für  $\alpha_2$  unterscheiden sich um einen Faktor 2), daß bei kleinen Detektorwinkeln der Einfluß der Divergenz des Primärstrahls überwiegt, obwohl diese wesentlich kleiner als die des Sekundärstrahls ist. Der Einfluß des Sekundärstrahls wird erst bei größeren Laborwinkel ( $20^\circ$ - $40^\circ$ ) zum dominierenden Faktor für das Winkelauflösungsvermögen (siehe He-Kr 25.08meV).

iii) Als Folge der sehr verschiedenen Werte für die beiden Strahldivergenzen ergibt sich in allen Fällen, daß  $\delta$  mehr oder weniger stark mit steigendem  $\theta_0$  anwächst. Zur Beschreibung dieser Abhängigkeit wird ein Potenzgesetz eingeführt:

$$(5.2.3) \quad \delta(\theta_0) = \delta_0 \cdot (1 + \delta_1 \cdot \theta_0^{\delta_2}) \quad .$$

Die Ausgleichsgerade in der doppelt-logarithmischen Auftragung von  $\delta - \delta_0$  über  $\theta_0$  gleicht auch die Schwankungen aus, die trotz der großen Zahl von Punkten bei der Monte-Carlo-Integration immer noch auftreten. Eine Aufstellung der Werte, die sich für  $\delta_0$ ,  $\delta_1$  und  $\delta_2$  ergeben, enthält Tabelle 5

Um die Mittelungsfunktion, die bisher nur numerisch vorliegt, einfacher handhaben zu können, wird sie, wie bei [Schleusener, 78] beschrieben, durch eine analytische Form angenähert, die sich als Produkt aus einem winkel- und einem geschwindigkeitsabhängigen Teil darstellen läßt:

$$(5.2.4.) \quad F(g, \theta; \theta_0) = F_g(g - \bar{g}) \cdot F_\theta(\theta - \bar{\theta}) \quad , \quad (a)$$

$$F_\theta(\theta - \bar{\theta}) = \begin{array}{ll} 1 & \text{für } |\theta - \bar{\theta}| \leq \delta \\ 0 & \text{für } |\theta - \bar{\theta}| > \delta \end{array} \quad , \quad (b)$$

$$F_g(g - \bar{g}) = \exp\left[-4 \ln 2 \left(\frac{g - \bar{g}}{\Delta g}\right)^2\right] \quad . \quad (c)$$

Dieser Produktansatz aus Rechteck- und Gaußfunktion wurde von J. Schleuse-  
ner bei verschiedenen Systemen getestet, die aufgrund folgender Gemeinsam-  
keiten ähnliche Verteilungen  $F(g, \theta; \theta_0)$  haben:

- i)  $m_1 < m_2$  ,
- ii)  $v_1 > v_2$  ,
- iii)  $S_1 \geq S_2$  ,
- iv)  $\alpha_1 < \alpha_2$  .

Tabelle 4: Strahleigenschaften

$p_0$  - Druck in der Strahlquelle  
 $d$  - Düsenlochdurchmesser  
 $DS$  - Abstand Düse-Skimmeröffnung  
 $v_w$  - wahrscheinlichste Geschwindigkeit  
 $S$  - Geschwindigkeitsverhältnis  
 $\alpha$  - halber Strahldivergenzwinkel [in Grad]

System	$\frac{E_{CM}}{\text{meV}}$	Primärstrahl						Sekundärstrahl					
		$\frac{p_0}{\text{bar}}$	$\frac{d}{\mu\text{m}}$	$\frac{DS}{\text{mm}}$	$\frac{v_w}{\text{m/s}}$	$S$	$\alpha$	$\frac{p_0}{\text{bar}}$	$\frac{d}{\mu\text{m}}$	$\frac{DS}{\text{mm}}$	$\frac{v_w}{\text{m/s}}$	$S$	$\alpha$
He-Ne	65.05	11	40	15	1776	15	0.59	50	33	10	777	100	1.8
He-Kr	25.08	12	30	20	1060	108.7	0.57	0.5	200	6	378.6	25.8	3.0
	65.29	15	30	10	1777	36.5	0.61	0.5	200	6	378.6	25.8	3.0
He-Xe	22.35	12	30	35	1009	43.5	0.52	0.3	200	12	306.7	21.5	1.5
	67.20	10	30	35	1802	22.6	0.52	0.4	200	12	308.7	18.7	1.5

Tabelle 5: Mittelungsgrößen

$\theta_0$  - Detektorwinkel  
 $\bar{g}, \bar{v}$  - Relativgeschwindigkeit [in m/s] und Streuwinkel [in Grad]  
 des wahrscheinlichsten Newton-Diagramms  
 $\Delta g/\bar{g}$  - relative Halbwertsbreite [in %]  
 $\delta = \Delta\theta/2$  - halbe Halbwertsbreite [in Grad]  
 $\delta_0, \delta_1, \delta_2$  - siehe Gleichung (5.2.3.)

System	$\frac{E_{CM}}{meV}$	$\theta_0$	$\bar{v}$	$\bar{g}$	$\Delta g/\bar{g}$	$\delta$	$\delta_0$	$\delta_1$	$\delta_2$
He-Ne	65.05	5	6.05	1939	9.50	0.67	0.65	0.0096	0.84
		20	25.25		9.50	0.70			
		40	52.65		9.50	0.80			
He-Kr	25.08	5	5.32	1126	3.55	0.62	0.55	0.0218	0.96
		20	22.16		3.90	0.74			
		40	46.43		3.55	1.00			
	65.29	5	5.28	1817	4.96	0.60	0.59	0.00075	1.43
		20	21.67		4.95	0.60			
		40	44.58		4.40	0.68			
He-Xe	22.35	5	5.22	1054	3.41	0.52	0.515	0.000054	1.94
		20	21.64		3.41	0.53			
		40	45.14		3.41	0.55			
	67.20	5	5.19	1828	6.54	0.53	0.52	0.0022	1.14
		20	21.19		6.54	0.54			
		40	43.40		6.80	0.58			



c) Fehlerbetrachtung

Zur Kontrolle der Mittelungsrechnung wird zuerst eine Helium-Neon-Winkelverteilung ( $E_{CM} = 65.05$ ) gemessen. Ein solches Experiment ist schon an einer anderen Apparatur durchgeführt und besonders sorgfältig ausgewertet worden [Schleusener, 78]. Daher wird ein aus dem dort angepaßten HFD-A-Potential errechneter Streuquerschnitt zum Testen benutzt. Wie in Abbildung 11 gezeigt, ist die mit dem Monte-Carlo-Programm berechnete Mittelung ( $\Delta g/\bar{g} = 9.5\%$ ,  $\delta_0 = 0.65^\circ$ ) deutlich zu schwach. Da die Mittelung hauptsächlich von der Winkelabhängigkeit kontrolliert wird, wird folglich  $\delta_0$  vergrößert. Erst wenn das Auflösungsvermögen nur etwa halb so groß angenommen wird ( $\delta_0 = 1.25^\circ$ ), stimmt die Rechnung mit den Meßpunkten überein. Ähnlich verhalten sich auch die Ergebnisse der Monte-Carlo-Rechnungen für die Systeme He-Kr und He-Xe. Bei den vier gemessenen Verteilungen müssen die  $\delta_0$ -Werte um etwa einen Faktor 2 erhöht werden. Zum Einstimmen von  $\delta_0$  dient das Verhältnis der Intensitäten zweier Extrema, das sich bei den hier durchgeführten Variationen des Potentials nicht verändert (näheres siehe Abschnitt 6.3.).

Die Ursache für die Diskrepanz ist im Auslassen der Integration über das Streuvolumen und den Raumwinkel des Detektors zu suchen. Die Voraussetzungen dieser Näherung, die, wie sich bei der Auswertung vieler Experimente an der bei [Schleusener, 78] beschriebenen Apparatur gezeigt hat, dort hinreichend gut erfüllt sind (die Werte für  $\delta_0$  mußten nur um etwa 10-20% nach oben korrigiert werden), scheinen für die in Abschnitt 4.6. beschriebene Detektorgeometrie der neuen Streuapparatur nicht mehr ganz gegeben. Hier ist der Abstand des Ionisators vom Zentrum des Streuvolumens nur noch 381mm und die Größe des Volumens, das der Detektor einsehen kann, beträgt 6.5mm, während sich bei der älteren Streuapparatur diese Werte auf 560 bzw. 5mm belaufen, so daß der Raumwinkel unter dem das Streuvolumen vom Detektor

aus eingesehen wird, zu groß ist, um vernachlässigt zu werden. Allein aufgrund der Größe des Streuvolumens trägt schon Streuung unter verschiedenen Winkeln  $\theta$  zur Intensität auf einem Detektorwinkel  $\theta_0$  bei, während die mit den oben erläuterten Rechnungen erhaltene Breite der Verteilung in  $\theta$  nur von den verschiedenen Geschwindigkeitsvektoren der kollidierenden Partikel vor dem Stoß herrühren.

Ein weiterer Grund für den zu schwachen Effekt der simulierten Mittelung ist sicher die Annäherung der Verteilungsfunktion  $F$  nach Gleichung (5.2.4.). Wie schon in den Abbildungen bei [Schleusener, 78] zu sehen ist, ist die Näherung von  $F_\theta$  durch eine Rechtecksfunktion nicht sehr genau. Die Beiträge mit  $|\theta - \bar{\theta}| > \delta$ , die auf die Mittelung einen Einfluß haben können, werden bei der Integration in Gleichung (5.1.12) ausgelassen.

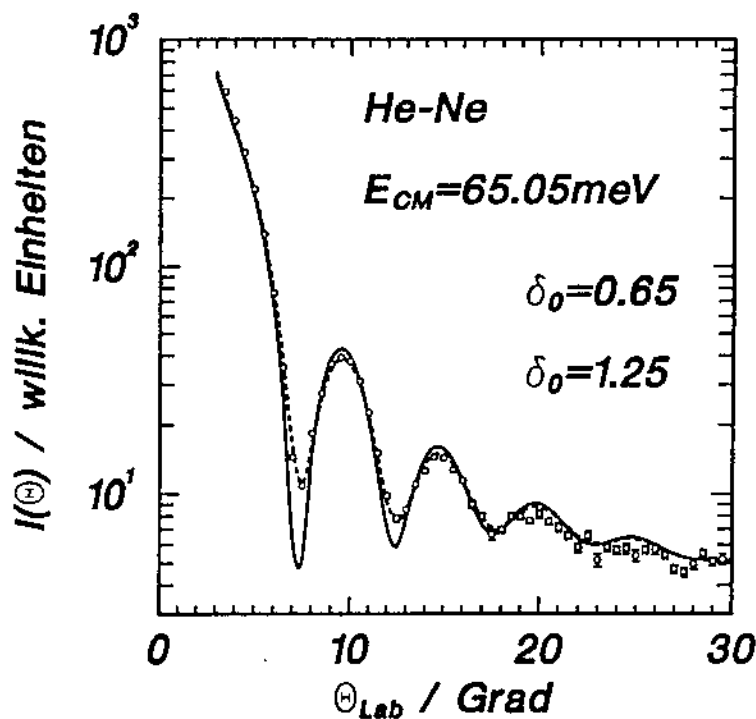


Abbildung 11:

Vergleich eines nach den Ergebnissen Monte-Carlo-Integration gemittelten Querschnitts ( $\delta=0.65^\circ$ ,  $\Delta g/g=9.5\%$ ) und einer entsprechend den Meßwerten korrigierten Mittelung ( $\delta=1.25^\circ$ ,  $\Delta g/g=9.5\%$ ) mit einer experimentellen Winkelverteilung.

### 5.3. Das Anpassungsprogramm

Zur Querschnittsberechnung und zur Auswertung der gemessenen Winkelverteilungen wird ein umfangreiches FORTRAN-Programm benutzt, das in seinen verschiedenen Teilen von McGuire, J. Schleusener und H. Meyer entwickelt worden ist und im Rahmen dieser Arbeit nur noch überarbeitet werden mußte. Die wesentlichen Schritte des Programms, die auch einzeln angewandt werden können, sind:

- a) - Berechnung von differentiellen Steuquerschnitten aus einem vorgegebenen Potential
  - (Auch inelastische Prozesse können berechnet werden)
- b) - Durchführung der Mittelung
  - Transformation ins Laborkoordinatensystem
- c) - Korrektur gemessener Winkelverteilungen
  - Vergleich Experiment-Theorie
  - Chi-Quadrat-Summe
- d) - Variation von Potentialparametern
  - Minimierung der Chi-Quadrat-Summe

#### a) Berechnung der Querschnitte

Die elastischen Streuquerschnitte werden voll quantenmechanisch in der Born-Oppenheimer-Näherung berechnet [Child, 74]. Die Grundzüge dieser Methode sowie einige Besonderheiten des Programms von McGuire sollen hier kurz erläutert werden.

Für Streuung an einem kugelsymmetrischen Potential hängt die Wechselwirkung  $V$  nur vom Betrag des Abstandsvektor  $\vec{r}$  der beiden Atomkerne ab. Für die Kernwellenfunktion  $\Psi$  ergibt sich als Schrödinger-Gleichung

$$(5.3.1.) \quad [\nabla^2 + k^2 - U(r)] \Psi(\vec{r}) = 0$$

$$\text{mit} \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

$$\text{und} \quad U(\vec{r}) = \frac{2\mu V(\vec{r})}{\hbar^2} .$$

Im asymptotischen Bereich ( $r \rightarrow \infty$ ) muß die Wellenfunktion, die das Streuexperiment charakterisierende Randbedingung

$$(5.3.2.) \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(\vec{r}) = \tilde{\Psi}(\vec{r}) + f(\theta) e^{ikr}/r$$

erfüllen. Hierbei ist  $\tilde{\Psi}(\vec{r})$  diejenige Wellenfunktion, die sich ohne das streuende Potential ergäbe (in der Regel eine ebene Welle). Der zweite Term auf der rechten Seite stellt eine vom Streuzentrum ausgehende Kugelwelle dar. Aus ihrer Winkelabhängigkeit ergibt sich der differentielle Streuquerschnitt zu

$$(5.3.3.) \quad \frac{d\sigma}{d\omega} = |f(\theta)|^2 .$$

Um die Streuamplituden  $f(\theta)$  berechnen zu können, betrachtet man die Lösungen der Schrödingergleichung. Dazu wird  $\Psi(\vec{r})$  nach Legendre-Polynomen (Drehimpulseigenfunktion) entwickelt

$$(5.3.4.) \quad \Psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} A_{\ell} \psi_{\ell}(r) P(\cos\theta) \quad .$$

Für jedes  $\psi_{\ell}$  ergibt sich dann eine eindimensionale Schrödingergleichung

$$(5.3.5.) \quad \left[ \frac{d}{dr^2} + k^2 - U(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \psi_{\ell}(r) = 0$$

Im folgenden wird das Verhalten der Wellenfunktionen weit entfernt vom streuenden Potential ( $r \rightarrow \infty$ ) diskutiert. Vergleicht man die Lösungen  $\tilde{\psi}_{\ell}$ , die sich für  $U(r)=0$  ergeben, die Besselfunktionen, mit den Lösungen  $\psi(r)$  der vollen Schrödingergleichung (5.3.5.), findet man sehr ähnliche Ergebnisse:

$$(5.3.6.) \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{\psi}_{\ell}(r) \sim \sin(kr - \ell\pi/2)$$

$$(5.3.7.) \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\ell}(r) \sim \sin[kr - \ell\pi/2 + \eta(\ell)] \quad .$$

Anschaulich gesehen besteht die Wirkung des Potentials in einer Verschiebung der Wellenfunktionen für die verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen  $\ell$  um die Streuphase  $\eta(\ell)$ . Setzt man diesen Ansatz in (5.3.2.) ein, erhält man mit (5.3.3.) als quantenmechanischen Streuquerschnitt

$$(5.3.8.) \quad \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \exp[(2i\eta(\ell))] P_{\ell}(\cos\theta) \quad .$$

Zur Berechnung der Streuphase werden die Schrödingergleichungen (5.3.5.) nach dem de Vogelaer-Algorithmus gelöst. Die Summation über  $l$  bricht bei  $\eta(l) < 0.001$  ab. Dieser Wert ist für die hier untersuchten Edelgassysteme bei 100 ( $\approx 25 \text{ meV}$ ) bzw. bei 150 ( $\approx 65 \text{ meV}$ ) erreicht. Um Rechenzeit zu sparen, wird ab  $l=100$  der Verlauf der Phase durch ein Potenzgesetz

$$(5.3.9.) \quad \eta(l) = \frac{C}{l^N}$$

extrapoliert. Abbildung 12 zeigt den Verlauf der Streuphase  $\eta$  in Abhängigkeit von  $l$  für zwei verschiedene Stoßenergien für das System Helium-Xenon.

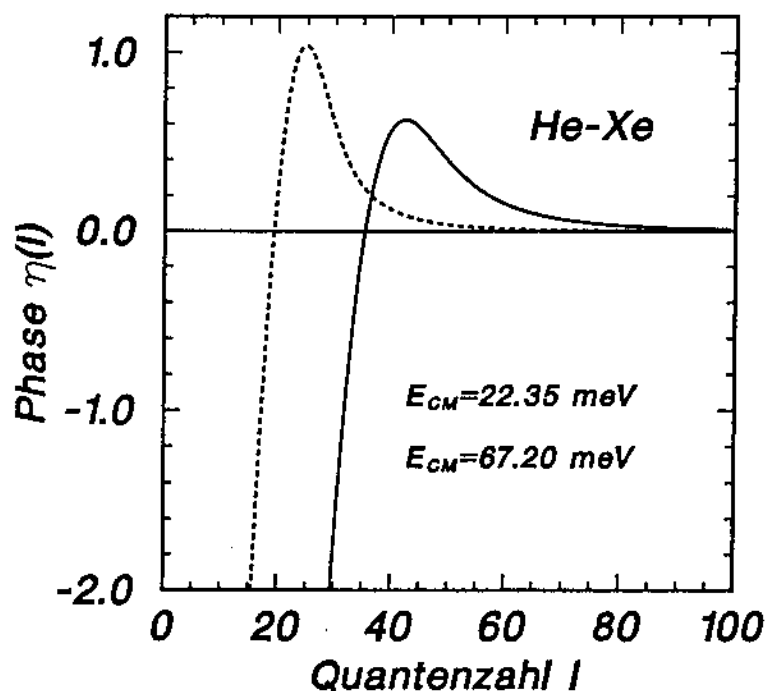


Abbildung 12: Streuphasen

Abhängigkeit der Streuphase von der Drehimpulsquantenzahl  $l$  für zwei verschiedene Stoßenergien.

Im Bereich des Potentialtopfs ist die Wellenlänge der Oszillationen von  $\psi$  kleiner als von  $\tilde{\psi}$ , der asymptotische Teil der Wellenfunktion  $\psi$  verschiebt sich zu kleineren  $r$  und  $\eta$  nimmt einen positiven Wert an, der bei niedrigerer Stoßenergie größer ist. Dieser Effekt nimmt mit wachsendem  $l$  ab, weil dann der Zentrifugalterm in (5.3.5.) überwiegt. Für kleine  $l$  überwiegt der Repulsivteil des Potentials und  $\eta$  nimmt negative Werte an.

#### b) Mittelung der Querschnitte

Nur die Breiten  $\delta$  und  $\Delta g/\bar{g}$  der Apparaturmittelungsfunktion werden für die Integration über  $g$  und  $\theta$  nach Gleichung (5.1.12.) als Eingabe benötigt. Dazu wird die analytische Form nach Gleichung (5.2.4.) eingesetzt und man erhält:

$$(5.3.10.) \quad I(\theta_0) \sim J(\theta_0) \int_{g_{\min}}^{g_{\max}} dg \int_{\bar{\theta}-\delta}^{\bar{\theta}+\delta} d\theta \frac{d\sigma}{d\omega}(g, \theta) \exp\left\{-4\ln 2 \left(\frac{g-\bar{g}}{\Delta g}\right)^2\right\}.$$

Hierbei ist  $J(\theta_0)$  der Jacobi-Faktor für das wahrscheinlichste Newtondiagramm. Die Abhängigkeit vom Jacobi-Faktor, die ursprünglich in  $F(g, \theta, \theta_0)$  in Gl. (5.2.2) enthalten ist, entfällt beim Einführen der auf eins normierten Näherung für  $F$  in Gl. (5.2.4.).

Folgende Punkte sind bei der Ausführung der numerischen Integration erwähnenswert:

- i) Die Integrationsgrenzen  $g_{\min}$  und  $g_{\max}$  werden so gewählt, daß die Gaußfunktion  $F_g$  bei  $F_g(g_{\min}) = F_g(g_{\max}) = 5\%$  abgeschnitten wird.

- ii) Die Integrationsgrenzen  $\bar{\theta}-\delta$  und  $\bar{\theta}+\delta$  entsprechen der Rechteckfunktion  $F_{\theta}(\theta-\bar{\theta})$ .
- iii) Die Berechnung des Integranden an nur 12·12 Stützstellen hat sich als ausreichend erwiesen. Die Integration wird nach der Gauß-Tschebyscheff-Methode durchgeführt.
- iv) Um nicht für jede der g-Stützstellen von neuem den Querschnitt aus dem Potential berechnen zu müssen, wird auf eine bei [Schleusener, 78] empirisch gefundene Näherung der g-Abhängigkeit zurückgegriffen. Für Relativgeschwindigkeiten g nahe beim wahrscheinlichsten Wert  $\bar{g}$  ergibt sich

$$(5.3.11.) \quad \sigma(g, \theta) = \left(\frac{g}{\bar{g}}\right)^{\beta} \cdot \sigma\left(\bar{g}, \theta\left(\frac{g}{\bar{g}}\right)^{\alpha}\right), \quad \frac{g-\bar{g}}{\bar{g}} \ll 1.$$

Die Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$ , die die Verschiebung der Oszillationsstruktur und die Veränderung der Oszillationsamplituden beschreiben, werden der Variation der Maxima der Diffraktionsoszillation für fünf verschiedene bei  $\bar{g}$ ,  $\bar{g} \pm 2.5\%$ ,  $\bar{g} \pm 5\%$  berechnete Querschnitte entnommen. Abbildung 13 zeigt im Fall von Helium-Krypton die verschiedenen Querschnitte. Mit wachsendem g verschieben sich die Oszillationen zu größeren Streuwinkeln und werden niedriger. Da dieses Verhalten für die einzelnen Maxima leicht unterschiedlich ist, werden die Exponenten  $\alpha$  und  $\beta$  für jedes Maximum einzeln bestimmt. Eine Aufstellung enthält Tabelle 6. Durch Interpolation erhält man die Winkelabhängigkeit  $\alpha(\theta)$  und  $\beta(\theta)$ . Die einfache Näherung ist gerechtfertigt, weil Testrechnungen gezeigt haben, daß die Abhängigkeit des gemittelten Querschnitts



nach Gl. (5.3.10.) von  $\Delta g/\bar{g}$  ohnehin nur sehr klein ist und daß bei vollständiger Rechnung ohne die Geschwindigkeitsskalierung nach Gl. (5.3.11.) das Ergebnis fast ununterscheidbar ist.

- v) Die sich so ergebenden Zwischenwerte für  $\theta$ , an denen  $d\sigma/d\omega$  berechnet werden muß, werden durch kubischen Spline interpoliert, da der ungemittelte Querschnitt nur an Punkten im Abstand von  $0.1^\circ$  vorliegt.

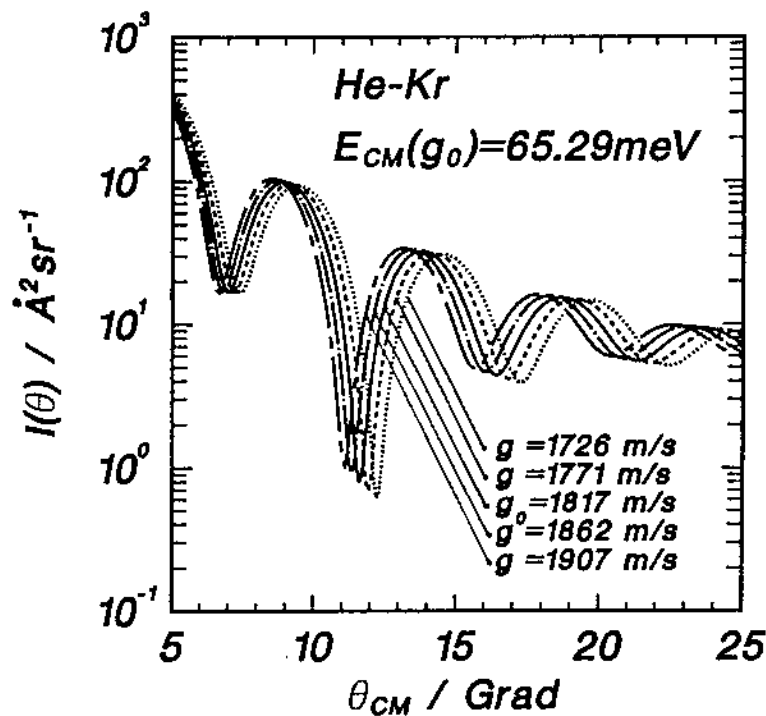


Abbildung 13: Geschwindigkeitsskalierung

Dargestellt sind fünf differentielle Streuquerschnitte für Stoßenergien im Abstand von 5%.

Tabelle 6: Geschwindigkeitsskalierung

N - Nummer des Maximums im diff. Querschnitt

$\theta$  - Lage des Maximums für  $g = \bar{g}$

$E_{CM}$  - Stoßenergie für  $g = \bar{g}$

$\alpha, \beta$  - Koeffizienten der Skalierung nach Gl. (5.3.11.)

He-Xe	$E_{CM} = 24.61 \text{ meV}$			$E_{CM} = 65.16 \text{ meV}$		
N	$\theta$	$\alpha$	$\beta$	$\theta$	$\alpha$	$\beta$
1	6.5	1.28	1.05	8.2	1.01	1.14
2	10.8	1.04	0.63	12.7	1.01	1.09
3	13.5	1.02	0.69	17.2	0.98	1.01
4	20.4	0.97	0.55	21.7	0.96	1.00
6	34.5	0.96	0.49			
He-Kr	$E_{CM} = 18.77 \text{ meV}$			$E_{CM} = 65.29 \text{ meV}$		
N	$\theta$	$\alpha$	$\beta$	$\theta$	$\alpha$	$\beta$
1	8.6	1.20	0.88	9.0	1.03	1.13
2	16.9	1.00	0.53	13.8	0.93	1.05
3	25.3	0.95	0.36	18.7	0.96	0.96
4	34.0	0.95	0.28	23.6	0.96	1.03
5	42.8	0.94	0.27	28.5	0.96	0.94

c) Vergleich mit experimentellen Werten

Im weiteren Verlauf der Berechnung werden die gemessenen Winkelverteilungen  $S(\theta)$ , die Ausgabe des DLI-Programms, bezüglich einiger systematischer Fehler berichtigt. Folgende vier Schritte führen zur korrigierten Intensität  $I_{\text{Exp}}(\theta_0)$ :

- i) Der Nullpunkt der Winkelskala muß der Richtung des Primärstrahls entsprechen (s. Abschnitt 4.2.)

$$(5.3.12.) \quad I(\theta_0) = S(\theta - \theta_{\text{Prim}})$$

- ii) Die Nachweiswahrscheinlichkeit des Ionisationsdetektors, die umgekehrt proportional zur Geschwindigkeit  $\bar{v}_1^f$  ist, muß entsprechend ausgeglichen werden (s. Abschnitt 2.3a).

$$(5.3.13.) \quad I_{\text{Exp}}(\theta_0) \sim \bar{v}_1^f(\theta_0) \cdot I(\theta_0)$$

- iii) Die Restgasstreuung in der Streukammer, die, wie in Abschnitt 4.5. diskutiert, winkelabhängig ist, muß berücksichtigt werden.

$$(5.3.14.) \quad I_{\text{Exp}}(\theta_0) \sim I(\theta_0) \cdot 10^{K \cdot \theta_0}$$

- iv) Eine Streuvolumenkorrektur (s. Abschnitt 4.6.) ist hier nicht erforderlich.

Die so korrigierten experimentellen Winkelverteilungen  $I_{\text{Exp}}(\theta_0)$  sind jetzt bis auf einen konstanten Faktor  $c$  direkt mit den theoretisch berechneten, gemittelten Intensitäten  $I_{\text{Th}}(\theta_0)$  vergleichbar. Um ein Maß für die Übereinstimmung zwischen Experiment und Berechnung zu erhalten, führt man die Chi-Quadrat-Summe (über  $N$  Meßpunkte) ein:

$$(5.3.15.) \quad \sum_{i=1}^N \chi_i^2 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{cI_{\text{Exp}}(\theta_{0i}) - I_{\text{Th}}(\theta_{0i})}{c\Delta I_{\text{Exp}}(\theta_{0i})} \right)^2 .$$

Der Skalierungsfaktor  $c$  wird so bestimmt, daß die Chi-Quadrat-Summe minimal ist.

Die Meßfehler  $\Delta I_{\text{Exp}}$  entsprechen der doppelten Standardabweichung  $\sigma$  des Streusignals nach Gl. (4.1.1.). Die Werte für  $\sigma$  werden allerdings vorher auf mindestens 1% gesetzt, um einzelnen Punkten, bei denen sich ein sehr kleiner Wert für  $\sigma$  ergibt, kein zu hohes statistisches Gewicht zu geben. Im Bereich kleiner Winkel wird bei Zählraten über 1000Hz  $\sigma$  auf 2% gesetzt, um systematische Fehler, die sich bei sehr kleinen Streuwinkeln durch das Annähern an den Primärstrahl oder durch nichtlineares Verhalten des Channeltrons ergeben können, in der Chi-Quadrat-Summe mit zu berücksichtigen. Die Fehlerbalken in den Grafiken der Winkelverteilungen entsprechen einer so korrigierten Standardabweichung.

Als ein Maß für die Abweichung der Winkelverteilung, das auch von der Anzahl der Punkte unabhängig ist, findet man den rms-Wert ("root mean square")

$$(5.3.16.) \quad \text{rms} = \left( \frac{\sum_{i=1}^N \chi_i^2}{N-1} \right)^{1/2} .$$

Ein rms-Wert unter 1 bedeutet, daß die gerechnete Winkelverteilung im Durchschnitt überall innerhalb der Fehler  $\Delta I_{\text{Exp}}$  der gemessenen Verteilung liegt.

#### d) Potentialanpassung

Durch Einführung der Chi-Quadrat-Summe besteht die Möglichkeit, verschiedene Potentiale hinsichtlich ihrer Fähigkeit, die Experimente zu reproduzieren, quantitativ zu vergleichen. Daher können Potentialparameter variiert werden, um ein Potential in gegebener Parametrisierung an eine gemessene Winkelverteilung anzupassen. Um einen Überblick über den Einfluß der Parameter auf die verschiedenen Teile des differentiellen Streuquerschnitts und somit die gemittelten Winkelverteilungen zu bekommen, werden zunächst Parameter in kleinen Schritten variiert und jedesmal eine Grafik erzeugt (siehe z.B.  $\epsilon$ -Variation bei He-Xe, Abschnitt 6.3.). Zur genauen Anpassung kommt die Fit-Routine ZXSSQ aus der IMSL-Programmbibliothek zur Anwendung. Sie basiert auf dem Levenberg-Marquardt-Algorithmus und ist für die Minimierung von Chi-Quadrat-Summen ausgelegt. Da für jede Wahl eines Satzes von Parametern 1 bzw. 1.5 Minuten CPU-Zeit benötigt werden, konnten hier nicht mehr als zwei Parameter gleichzeitig variiert werden. Der Vorgang der Variation kann beobachtet werden, da bei jedem Anpassungsschritt die Werte der Parameter und der Chi-Quadrat-Summe ausgedruckt werden. Es waren nur 30-50 Schritte erforderlich.

#### 5.4. Berechnung der zweiten Virialkoeffizienten

Die aus der Thermodynamik bekannten Zustandsgleichungen für Gase verknüpfen die Größen Volumen  $V$ , Druck  $p$  und Temperatur  $T$  miteinander. Eine Möglichkeit der Erweiterung der Gleichung für ideale Gase, bei denen nur elastische Stöße der Gaspartikel mit den Wänden einbezogen sind, auf reale Gase lautet

$$(5.4.1.) \quad \frac{pV}{RT} = 1 + \frac{B(T)}{V} + \frac{C(T)}{V^2} + \dots ,$$

wobei R die Gaskonstante ist. Der erste Term auf der rechten Seite, die Eins, charakterisiert das ideale Gas. Die weiteren Terme sind Korrekturen, die die Wechselwirkung der Teilchen untereinander berücksichtigen. Entsprechend den Potenzen von  $1/V$  beschreibt der zweite Virialkoeffizient  $B(T)$  die Zweiteilchenwechselwirkung, der dritte die Wechselwirkung dreier Teilchen miteinander, usw. Aus der Mittelung über alle Paare erhält man nach [Pack, 83] die klassische Beziehung für den zweiten Virialkoeffizienten einer Gasmischung

$$(5.4.2.) \quad B_{AB}^{(\sigma)}(T) = \frac{N}{2} \int d\vec{r} \left( 1 - \exp(-V(\vec{r})/kT) \right) ,$$

und als radiale Quantenkorrektur ergibt sich

$$(5.4.3.) \quad B_{ABr}^{(1)}(T) = \frac{N}{24(kT)^3} \frac{\hbar^2}{2\mu} \int d\vec{r} \exp(-V(\vec{r})/kT) \left( \frac{dV}{dr} \right)^2 .$$

Dabei steht N für die Loschmidt-Zahl und k für die Boltzmannkonstante.

Zur Berechnung wurde ein von M. Winter entwickeltes Programm freundlicherweise überlassen. Es ist ursprünglich für Gasmischungen aus einem Gas, das aus Atomen besteht, und einem Gas, das aus Molekülen besteht, die sich wie sphärische Kreisel verhalten, und deren Wechselwirkung anisotrop sein kann, konzipiert worden. Für die Berechnung des zweiten Virialkoeffizienten mit diesem Programm für das System Helium-Xenon in einem Temperaturbereich von 75 bis 350K (in Schritten von 25K) benötigt eine MICRO-VAX drei Minuten CPU-Zeit bei  $32^3$  Stützstellen für die numerische Integration.

## 6. Bestimmung des Helium-Xenon-Potentials

### 6.1. HFD-Potentialmodell

Um die Potentiale der isotropen Wechselwirkung der hier untersuchten Edelgassysteme durch eine analytische Funktion darstellen zu können, wird die weitverbreitete HFD-Form (Hartree-Fock-Dispersion) eingesetzt. Dieses Potentialmodell [Ahlrichs et al., 77] ist nicht ganz so flexibel wie verschiedene andere gebräuchliche Modelle, die aus getrennten Morse-, Exponential- und van-der-Waals-Teilen durch Spline zusammengefügt sind. Es hat dafür aber den Vorteil einer überschaubaren Anzahl von Parametern, die direkt mit ab-initio-Berechnungen verglichen werden können, da die Potentialfunktion sowohl für kleine als auch für große interatomare Abstände ein physikalisch sinnvolles Verhalten zeigt:

$$(6.1.1.) \quad V(R) = V_{\text{Rep}}(R) + V_{\text{Att}}(R) \cdot F(R)$$

Der Repulsivteil  $V_{\text{Rep}}$  des Potentials beschreibt die Abstoßung bei kleinen Kernabständen, die durch das Überlappen der Elektronenhülle zustandekommt und kann aus sog. "self-consistent-field"-Hartree-Fock-Berechnungen gewonnen werden

$$(6.1.2.) \quad V_{\text{Rep}}(R) = A \exp(-\alpha R) \quad .$$

Da die Wechselwirkung des Systems Helium-Xenon sich wegen der großen Anzahl von Elektronen durch ab-initio-Berechnungen nur mit Schwierigkeiten behandeln läßt, liegen keine genauen theoretischen Werte für A und  $\alpha$  vor. Bei Anpassungsrechnungen kann daher  $\alpha$  variiert werden, während A sich aus einem vorgegebenen Wert für den Nulldurchgang des Potentials ergibt (siehe Abschnitt 6.2).

Der Attraktivterm  $V_{\text{Att}}$  beschreibt die Anziehung infolge der van-der-Waals-Kräfte, die sich durch eine nur quantenmechanisch erklärbare Korrelation der Elektronenbewegung in den beiden Atomen ergibt. Er kann für große Abstände als Multipolentwicklung in Potenzen von  $1/R$  dargestellt werden:

$$(6.1.3.) \quad V_{\text{Att}}(R) = - \frac{C_6}{R^6} - \frac{C_8}{R^8} - \frac{C_{10}}{R^{10}} - \dots$$

Um die Anzahl der freien Parameter zu reduzieren, werden hier zur Berechnung der höheren Terme Rekursionsformeln angewendet, die sich bei [Douketis et al., 82] finden:

$$(6.1.4.a) \quad C_{10} \approx 1.225 \, C_8^2 / C_6$$

$$(6.1.4.b) \quad C_{12} \approx 1.028 \, C_6 \, (C_{10}/C_8)^3$$

$$(6.1.4.c) \quad C_{14} \approx 0.975 \, C_8 \, (C_{12}/C_{10})^3$$

Darüber hinaus existieren neue, sehr genaue Berechnungen für  $C_6$  [Kumar u. Meath, 85]:

$$(6.1.5.) \quad C_6 = (11.68 \pm 1\%) \, \text{eV} \, \text{\AA}^6$$

Folglich wird von den Dispersionskoeffizienten bei der Anpassung der Potentiale an die gemessenen Winkelverteilungen nur  $C_6$  als Variable betrachtet.

Eine Möglichkeit zur Berücksichtigung der Tatsache, daß die bei kleiner werdenden Abständen einsetzende Überlappung der Elektronenhüllen auch die Korrelation beeinflusst, besteht in der Einführung einer einfachen Dämpfungsfunktion [Ahlrichs et al., 77], die den attraktiven Teil abschneidet:



$$\begin{aligned}
 (6.1.6.) \quad F(R) &= \exp[-(D/R - 1)^2] , & R < D \\
 &= 1 & , \quad R \geq D \\
 \text{mit } D &= 1.28 R_M
 \end{aligned}$$

Sie ist durch Vergleich des sehr gut bekannten  $H_2-^3\Sigma_u^+$ -Potentials mit den Termen aus Gleichung (6.1.2.) und (6.1.3.) abgeleitet worden. Auch wenn diese Näherung bei größeren Atomen nicht exakt ist, wird sie dennoch von den Autoren als einfache Parametrisierung vorgeschlagen. Eine genauere Behandlung findet sich bei [Tang u. Toennies, 83]. Dort wird eine individuelle Dämpfung der einzelnen Terme in Gleichung (6.1.3.) vorgeschlagen. Da diese Dämpfungsfunktionen als einzigen Parameter den Wert  $\alpha$  aus Gleichung (6.1.2.) enthält, lassen sich Repulsion und Attraktion bei Anpassungsrechnungen nicht getrennt variieren.

## 6.2. Nulldurchgang des Potentials

Das Auftreten von Diffraktionsoszillationen kann in halbklassischer Betrachtung durch Interferenz von Partialwellen, die am repulsiven Teil des Potentials gestreut werden, mit solchen, die am attraktiven Teil gestreut werden, erklärt werden. Daher ist es auch anschaulich verständlich, daß gerade der Nulldurchgang  $\sigma$  des Wechselwirkungspotentials, also der atomare Abstand, bei dem die Potentiale der Repulsion und der Attraktion betragsmäßig gleich sind, direkt mit dem Abstand  $\Delta\theta$  dieser Oszillationen zusammenhängt:

$$(6.2.1.) \quad \Delta\theta \approx \frac{\pi \hbar}{\mu g \sigma}$$

Für die hier untersuchten Systeme mit kleinen reduzierten Massen sind die Werte von  $\sigma$  relativ klein (um  $3.5\text{\AA}$ ), da einer der beiden Stoßpartner, das Heliumatom, einen besonders kleinen Durchmesser hat. Daher liegen die Oszillationen so weit voneinander entfernt (in Abstand von einigen Grad), daß sie ohne extreme Anforderungen an die Winkelauflösung der Apparatur gemessen werden können. Ähnliche weit gespreizte Oszillationen findet man bei Raumtemperaturmessungen von He-Ne [Schleusener, 78] und He-Ar [Aziz et al., 79], während bei Systemen aus zwei größeren Atomen die schnellen Oszillationen nur in wenigen Fällen, wie z.B. Ar-Kr [Buck, 78] oder Na-Hg [Buck u. Pauly, 71], aufgelöst werden können. Schon der Abstand dieser Oszillationen allein ergibt hier direkt einen wesentlichen Potentialparameter, der sich näherungsweise auch ohne Mittelungs- und Anpassungsrechnungen ergibt, und mit dem ein vorgegebener Potentialtyp in der Abstands-koordinate geeicht werden kann.

Die Präzision bei der Bestimmung von  $\sigma$  hängt nur davon ab, wie genau die Relativgeschwindigkeit  $g$  bekannt ist. Die Konsistenz der zwei Werte für die Nullstelle der Potentialfunktion, die bei getrennten Anpassungsrechnungen für die Winkelverteilungen bei den beiden Stoßenergien resultieren, kann als Maß für die Genauigkeit dienen. Dazu wird ein Potential, das die Winkelverteilung schon näherungsweise richtig wiedergibt, mit  $\sigma$  entdimensioniert. Durch Variation von  $\sigma$  wird somit eine Streckung oder Stauchung des Potentials erzielt. Die Anpassungsrechnung ist problemlos. Die Chi-Quadrat-Summe weist bei einem bestimmten Wert von  $\sigma$  ein deutlich ausgeprägtes Minimum auf, da bei falscher Lage der berechneten Oszillationen die Chi-Quadrat-Summe sprunghaft ansteigt. Man erhält für die zwei Messungen folgende Ergebnisse:

$$(6.2.2a) \quad \sigma = 3.530 \text{ \AA} \text{ (67.20 meV)}$$

$$(6.2.2b) \quad \sigma = 3.557 \text{ \AA} \text{ (22.35 meV)}$$

Das in Abschnitt 6.4 vorgestellte beste Potential hat seinen Nulldurchgang bei

$$(6.2.3.) \quad \sigma = 3.548 \text{ \AA} .$$

Der Fehler für diesen Wert kann auf unter 1% abgeschätzt werden. Er ist damit wesentlich geringer, als es die Unsicherheiten der Flugzeitbestimmung nach Tabelle 2 erwarten lassen, die nur eine Obergrenze für einzelne Punkte des Flugzeitspektrums darstellen. Durch das Anpassen einer Verteilung nach Gleichung (3.1.4.) an die Spektren ergeben sich jedoch für die wahrscheinlichsten Geschwindigkeiten weit geringe Fehler.

Wie genau die Lage der gemessenen Oszillationen durch die Rechnungen wiedergegeben wird, zeigt Abb. 14. Zu erkennen ist auch, daß die Nullpunktskorrektur richtig vorgenommen wurde, da eine Verschiebung der gemessenen gegenüber der gerechneten Oszillationsstruktur nicht zu erkennen ist.

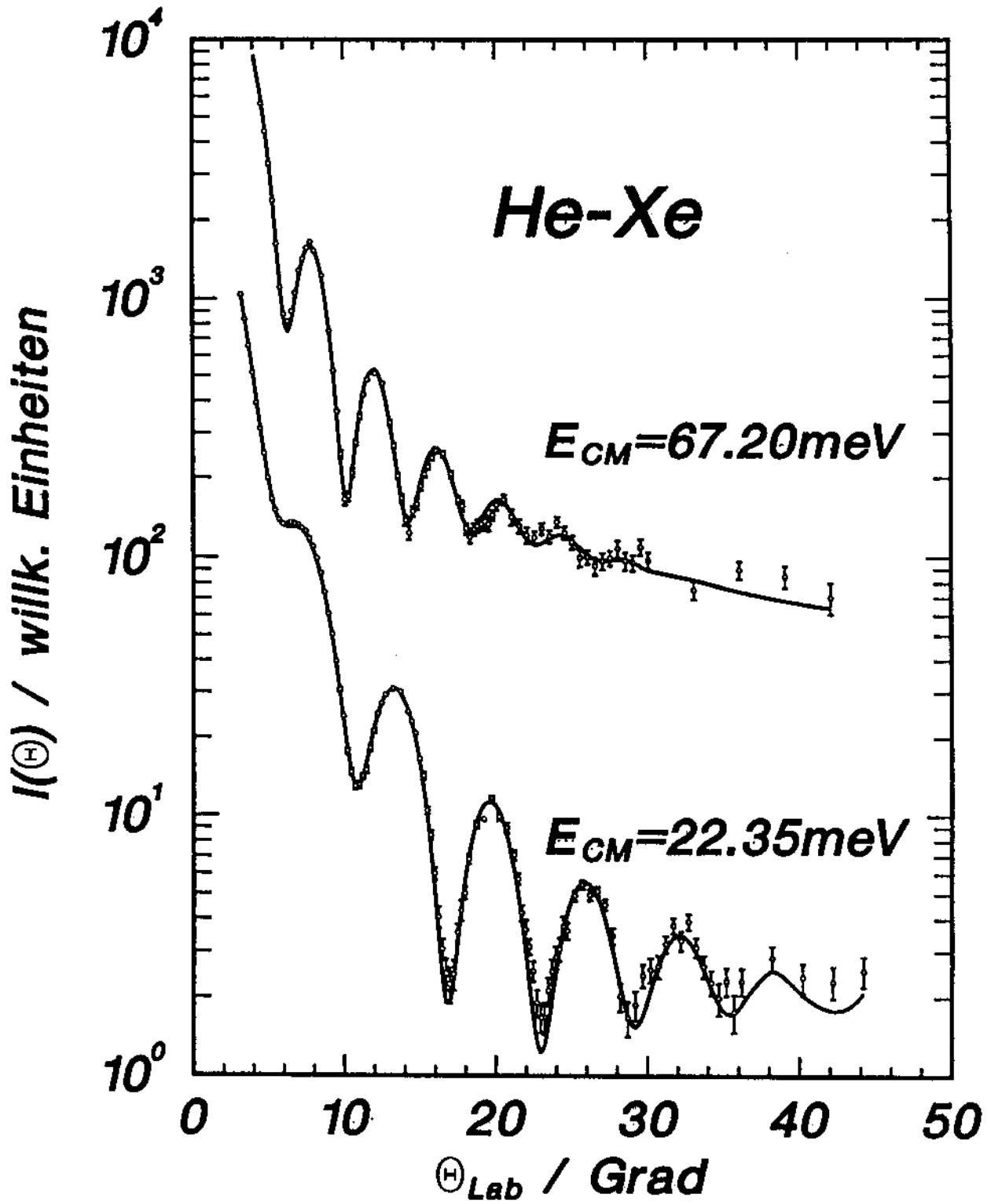


Abbildung 14:

Getrennte Anpassungen für jeweils einen Satz von Meßdaten. Die Potentialparameter sind in Tabelle 8 aufgestellt.

### 6.3. Topftiefe des Potentials

Bei Querschnitten, die auch eine aufgelöste Regenbogenstruktur zeigen, läßt sich die Tiefe  $\epsilon$  des Minimums der Potentialfunktion ähnlich einfach und genau wie der Nulldurchgang bestimmen. Aus der halbklassischen Beziehung für die Lage des Regenbogenmaximums

$$(6.3.1.) \quad \theta_R = 2 \frac{\epsilon}{E}$$

ergeben sich für das System He-Xe Werte von nur etwa  $11.5^\circ$  bzw.  $4.5^\circ$  für die niedrigere bzw. die höhere Stoßenergie, die vom Betrag her 10 bzw. 30mal größer als die Topftiefe ist und die mit den zur Verfügung stehenden experimentellen Techniken auch nicht weiter erniedrigt werden kann. Dieses Maximum liegt fast verborgen unter dem Abfall der Querschnitte nahe der Vorwärtsstreuung. Lediglich an der Tiefe der Minima der schnellen Oszillationen ist es zu erkennen: Bei reiner Diffraktionsstruktur wären die ersten Minima am tiefsten.

Zur Bestimmung der Topftiefe kann jedoch der allgemeine Abfall des differentiellen Steuquerschnitts herangezogen werden. Für Streuwinkel jenseits des Regenbogenmaximums  $\theta_R$ , wo nach klassischer Streutheorie keine Intensität mehr zu erwarten ist, kann der Verlauf des Querschnitts mithilfe der Regge-Theorie abgeschätzt werden [Bosanac et al.]:

$$(6.3.2.) \quad \frac{d\sigma}{d\omega} \sim \exp(-2\theta/\theta_R) \sim \exp(-2\theta/\epsilon)$$

Danach sollte der Abfall um so steiler sein, je kleiner  $\epsilon$  ist. Das ist jedoch deutlich nur bei großen Unterschieden in  $\epsilon$  festzustellen [Aziz et al., 79], [Andres et al., 82].

Sehr viel empfindlicher dagegen reagieren die Amplituden der Minima auf Änderungen der Potentialtopftiefe [Schleusener, 78]. Dies kann folgendermaßen demonstriert werden: Bei Variation der freien Parameter  $\alpha$  und  $C_8$  soll die vorher einjustierte Lage der Diffraktionsoszillationen konstant gehalten werden. Dazu wird A stets so berechnet, daß sich der in Gleichung (6.2.3.) genannte Wert für den Nulldurchgang des Potentials ergibt. Aus der Forderung  $V(\sigma) = 0$  erhält man durch Einsetzen von Gleichung (6.1.1.)

$$(6.3.4.) \quad A = \sum_{n=0}^4 \frac{C_{2n+6}}{\sigma^{2n+6}} \cdot F(\sigma) / \exp(-\alpha\sigma) .$$

Zur Veranschaulichung wird hier der Wert des Hartree-Fock-Parameters  $\alpha$  variiert. Die Resultate für die Tiefe  $\epsilon$  und die Lage  $R_M$  des Potentialminimums, die sich für drei verschiedene Werte von  $\alpha$  ( $\pm 10$  um den später erhaltenen Wert für das beste Potential) ergeben, sind in Tabelle 7 aufgelistet. Dort finden sich auch die rms-Werte, die man bei Vergleich der aus diesen Potentials errechneten Winkelverteilungen mit den Messungen erhält. Bei Variation von  $\alpha$  um  $\pm 10\%$  ergeben sich bei annähernd konstantem Minimumsabstand  $R_M$  Änderungen der Topftiefe um ungefähr 20%. Die Abbildungen 15 und 16 zeigen die drei verschiedenen Rechnungen bei beiden Stoßenergien. Wie bereits oben erwähnt, ist trotz der großen relativen Änderung das verschiedene Abfallen der Querschnitte zu großen Streuwinkeln hin zumindest im hier betrachteten Winkelbereich kaum zu erkennen. Deutlich tritt dagegen ein anderer Effekt hervor: Je größer die Tiefe des Potentialtopfes ist, desto eher setzt das Abklingen der Oszillationsstruktur ein, d.h. schon bei kleineren Winkeln fangen die Minima an, flacher zu werden.

Beginnt man die Minima von kleinen Winkeln her zu zählen (die Schulter bei  $6.5^\circ$  in der 22.35meV-Messung wird nicht einbezogen), stellt man fest, daß dieser Unterschied sich erst ab dem dritten Minimum bemerkbar macht. Bei den beiden ersten Minima ist ein schwächerer Trend in entgegengesetzter Richtung zu erkennen, der jedoch bei den hier zur Diskussion stehenden Differenzen der Topftiefe, die wesentlich kleiner als die in Tabelle 7 angegebenen Differenzen sind, keine Rolle mehr spielt. Der Grund hierfür ist in der Dämpfung der ersten Oszillationen durch das verdeckte Regenbogenmaximum zu suchen. Daher kann das Intensitätsverhältnis der ersten Oszillation zum Einjustieren des Mittelungsparameters  $\delta_0$  dienen. Somit ergibt sich als gute Methode für die Bestimmung der Topftiefe der Vergleich der Intensitäten im zweiten, dritten und vierten Minimum. Da hier relative Veränderungen der Intensitäten in den Minima betrachtet werden, hat auch ein Fehler bei der Einstellung von  $\delta_0$  keinen Einfluß, da dieser Parameter eine gleichmäßige Dämpfung der Oszillationsstruktur festlegt. Insbesondere die Minima der bei niedriger Stoßenergie gemessenen Winkelverteilung, die eine Tiefe von bis zu einer Zehnerpotenz haben, und die durch die vielen Meßpunkte im Abstand von nur  $0.25^\circ$  sehr genau vermessen sind, ermöglichen es, den Wert der Topftiefe bis auf einen Fehler von weniger als  $\pm 5\%$  einzugrenzen.

Tabelle 7: Variation des Potentialparameters  $\alpha$  bei konstantem Nulldurchgang  $\sigma=3.548 \text{ \AA}$ . Alle anderen Parameter entsprechen dem besten Potential (siehe Tabelle 8, dritte Spalte). Die rms-Werte sind entsprechend Gl. 5.3.16. aus den doppelten Standardabweichungen berechnet.

$\frac{\alpha}{\text{\AA}^{-1}}$	$\frac{A}{\text{eV}}$	$\frac{\epsilon}{\text{meV}}$	$\frac{R_M}{\text{\AA}}$	$rms\{67.20\text{meV}\}$	$rms\{22.35\text{meV}\}$
3.017	598.3	2.002	4.040	2.55	2.38
3.352	1965.	2.479	3.989	1.10	0.81
3.687	6446.	2.908	3.954	2.08	1.62

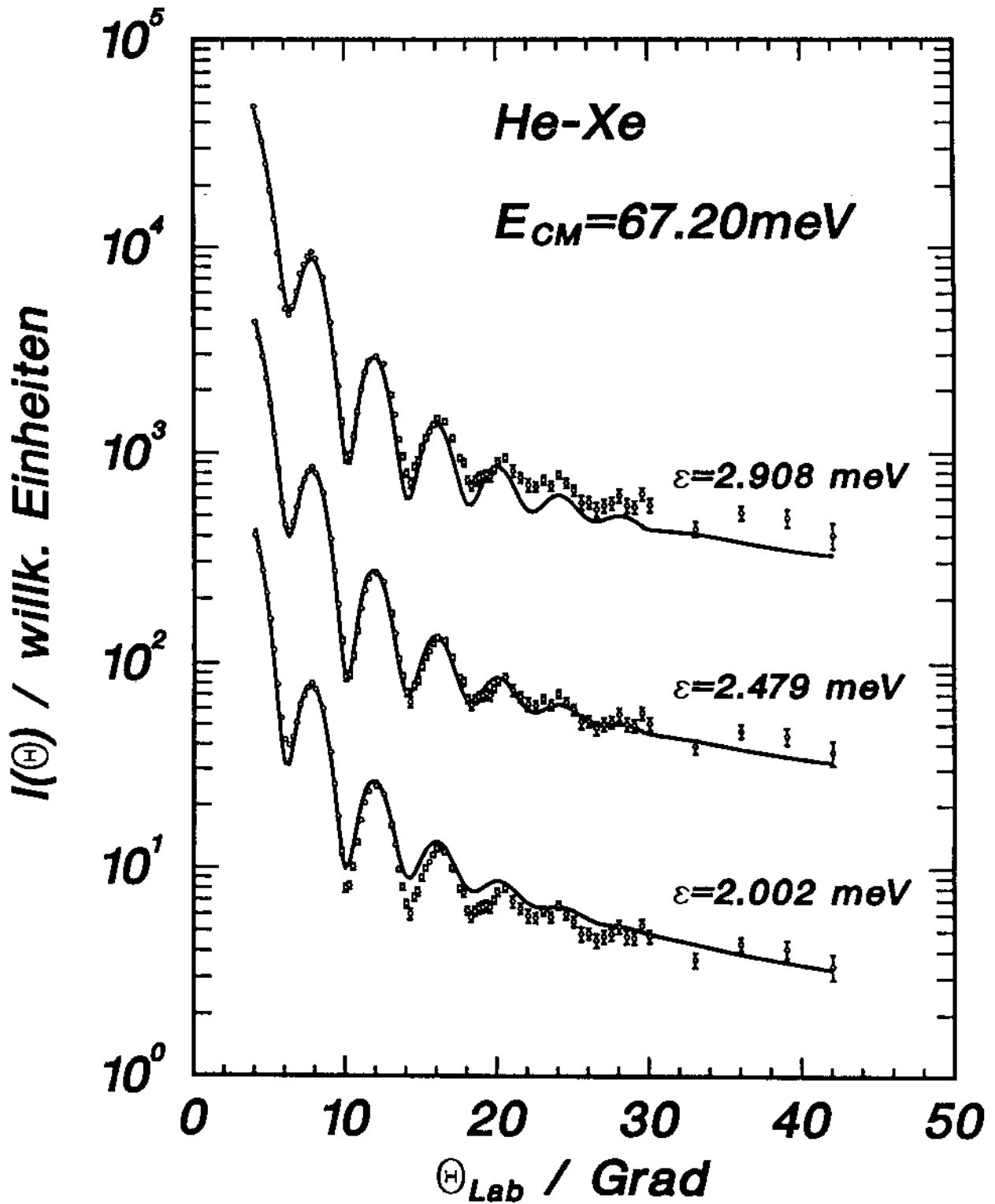


Abbildung 15:

Gerechnete Winkelverteilungen (durchgezogene Kurven) für drei verschiedene Werte der Topftiefe im Vergleich zu den Raumtemperaturmesswerten (Punkte mit Fehlerbalken). Die entsprechenden Potentialparameter finden sich in Tabelle 7.



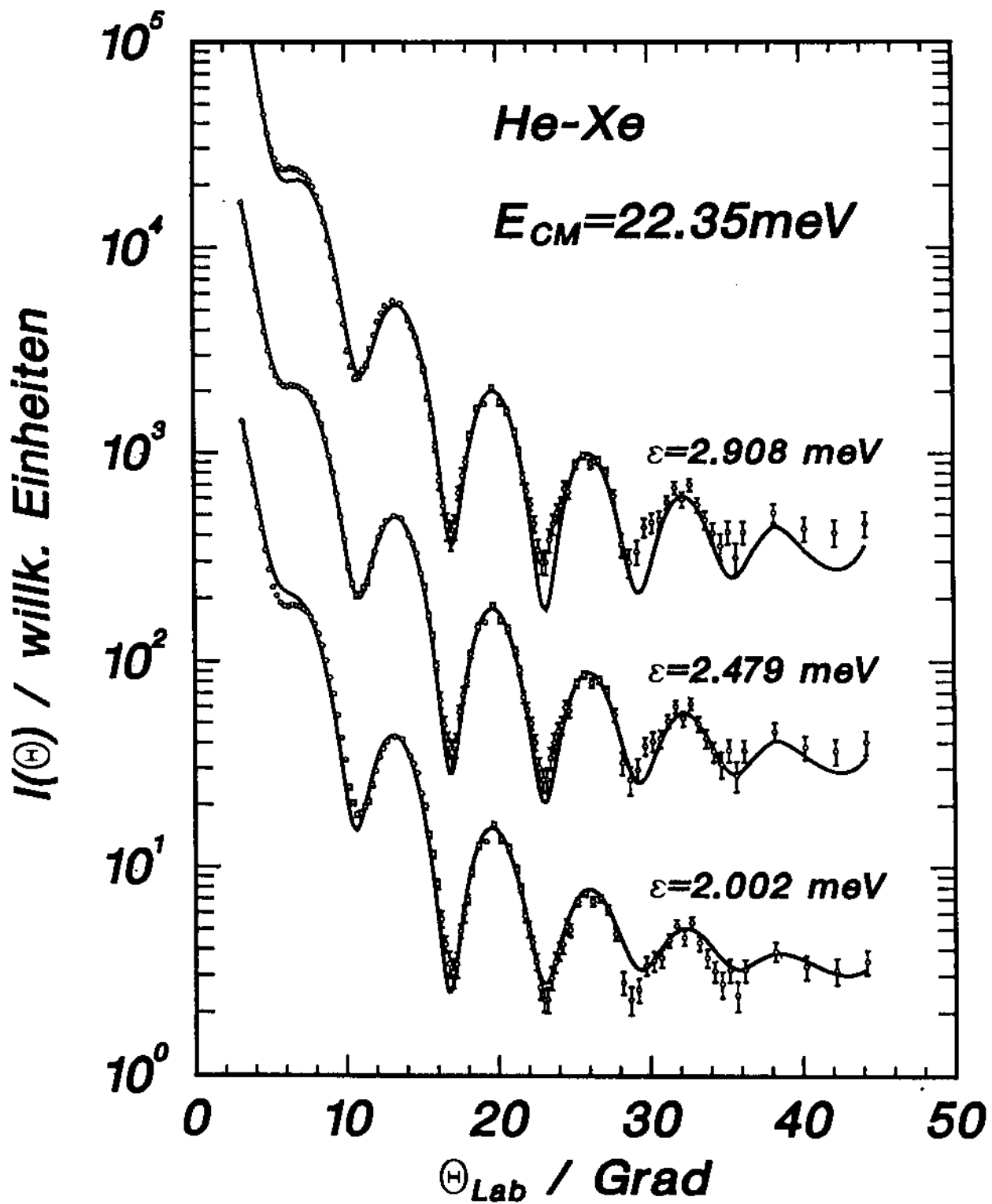


Abbildung 16:

Entspricht Abb. 15, jedoch sind die drei gerechneten Verteilungen und die Meßwerte für die niedrigere Stoßenergie dargestellt.

#### 6.4. Ermittlung des besten Potentials

Nachdem in den beiden vorangegangenen Abschnitten gezeigt wurde, wie empfindlich die gemessenen Winkelverteilungen vom Nulldurchgang und der Topftiefe abhängen, wird nun durch Anpassung das zugrundeliegende Wechselwirkungspotential ermittelt. Dazu wird, wie in Abschnitt 5.3.d beschrieben, durch Variation von ein oder zwei Potentialparametern die Chi-Quadrat-Summe minimiert. Als Ausgangswerte werden die bei [Danielson u. Keil, 88] vorgeschlagenen Parameter des dort vorgestellten HFD-A-Potentials (siehe Abschnitt 6.1.) benutzt. Für jede der beiden gemessenen Winkelverteilungen werden zunächst getrennte Rechnungen durchgeführt, bei denen die nur geringfügig verschiedenen Werte für  $\sigma$  nach Gleichung 6.2.2. über die in Gleichung 6.3.4. angegebene Beziehung konstant gehalten werden. Als erster Schritt wird nur der Dispersionskoeffizient  $C_6$  variiert, der durch Veränderung der äußeren Wand des Potentialtopfes dessen Tiefe beeinflusst. Der besonders große Wert ( $93.60\text{eV } \text{\AA}^6$ ) des HFD-A-Potentials könnte eine der Ursachen für die im Vergleich zu den hier vorliegenden Messungen zu große Topftiefe ( $2.636\text{meV}$ ) sein. Er weicht stark von den bei [Tang et al., 76] angegebenen Werten für eine obere und untere Grenze ( $69.5$  und  $43.2\text{eV } \text{\AA}^6$ ) ab. Die Anpassung führt schon nach etwa 10 Schritten zu stabilen Werten:

$$C_6 = 71.60\text{eV } \text{\AA}^6 \quad (67.20\text{meV})$$

$$C_6 = 88.36\text{eV } \text{\AA}^6 \quad (22.35\text{meV})$$

Da diese Rechnungen bei der niedrigeren Energie die Meßdaten noch nicht gut reproduzieren können, wird im nächsten Schritt gleichzeitig Repulsion und Attraktion mithilfe der Parameter  $\alpha$  und  $C_6$  variiert. Dadurch wird die Anpassung noch verbessert.

Die Parameter der beiden so erhaltenen Potentiale, die die jeweils besten Anpassungen an die einzelnen Datensätze der Messungen darstellen, sind in den ersten beiden Spalten von Tabelle 8 zusammengestellt. Die daraus simulierten Winkelverteilungen sind im Vergleich mit den Messungen in Abbildung 14 zu sehen: Die Lage der Oszillationen stimmt genau überein, die gemessenen Amplituden werden durch die Messung gut wiedergegeben. Im Bereich bis  $20^\circ$  liegt bei der Raumtemperaturmessung nur ein einziger Meßpunkt bei  $14.3^\circ$  deutlich unter der gerechneten Kurve, bei der anderen Messungen weist das Verhältnis der Intensitäten darauf hin, daß der bei der Anpassung erhaltene Wert für  $\epsilon$  um nicht mehr als 2-3% zu groß ist. Berücksichtigt man als Meßfehler die doppelte Standardabweichung (die Fehlerbalken in allen Abbildungen entsprechen der einfachen Standardabweichung), die auch bei der Berechnung der Chi-Quadrat-Summe zugrundegelegt wird, zeigt sich, daß mit den beiden Potentialen jeder Meßpunkt innerhalb seines Fehlers reproduziert werden kann.

Zur Bestimmung eines einheitlichen Potentials werden aus den angepaßten Werten für  $\alpha$  und  $C_8$  sowie den berechneten Werten für  $A$  die arithmetischen Mittelwerte gebildet. Diese Parameter sind in der dritten Spalte von Tabelle 8 aufgetragen. Dort sind auch für alle drei Potentiale die rms-Werte, bezogen auf beide Messungen, zusammengestellt. Erwartungsgemäß ist der aus dem an einen Datensatz angepaßten Potential erhaltene rms-Wert für diese Werte deutlich kleiner als der für die andere Messung. Die rms-Werte für das gemittelte Potential liegen für beide Stoßenergien dazwischen, jedoch bei beiden Messungen näher am niedrigeren Wert. Wegen dieses unkomplizierten Verhaltens, das die gute Kompatibilität der beiden Datensätze anzeigt, wird auf eine gleichzeitige Anpassung der Meßdatensätze verzichtet: Dazu müßte für jeden Satz von Potentialparametern ein Vergleich mit beiden gemessenen Winkelverteilungen (und evtl. auch den Transportdaten) erfolgen und die Summe der rms-Werte minimiert werden.

Tabelle 8: Parameter der einzeln angepaßten Potentiale und des gemittelten Potentials. Die angegebenen rms-Werte zeigen den Grad der Übereinstimmung mit den beiden gemessenen Winkelverteilungen.

	Anpassung an 22.35meV- Messungen	Anpassung an 67.20meV- Messungen	gemitteltes Potential
A/eV	1996.1	1930.9	1963.3
$\alpha/\text{\AA}^{-1}$	3.282	3.422	3.352
$C_0/\text{eV \AA}^0$	100.0	71.6	85.8
$R_M/\text{\AA}$	4.009	3.965	3.989
$\epsilon/\text{meV}$	2.540	2.418	2.479
$\sigma/\text{\AA}$	3.557	3.530	3.548
rms(22.35meV)	0.781	1.013	0.808
rms(67.20meV)	1.380	0.985	1.036
$\sum$ rms	2.161	1.998	1.844

#### 6.5. Vergleich mit den Literaturwerten

In diesem Abschnitt wird das in der oben beschriebenen Anpassungsprozedur erhaltene Potential mit zwei anderen Potentialen verglichen und die Abhängigkeiten der differentiellen Streuquerschnitte und der zweiten Virialkoeffizienten von Details des Potentialverlaufs werden diskutiert. Die Potentiale, die zum Vergleich herangezogen werden, stammen aus folgenden Veröffentlichungen:

i) HFD-1 [Smith et al., 77]

Dieses Potential wurde durch Anpassen von  $A$  und  $\alpha$  an zwei Winkelverteilungen erhalten, die bei ähnlichen wie den hier vorliegenden Stoßenergien gemessen wurden. Zur Diskriminierung verschiedener Kombinationen von  $A$  und  $\alpha$ , die bei den Streuquerschnitten zu gleich guter Übereinstimmung führten, wurden die Transportdaten herangezogen. Die Werte für die Dispersionskoeffizienten wurden von [Tang et al., 76] übernommen.

ii) HFD-A [Danielson und Keil, 88]

Durch gleichzeitiges Anpassen des Potentials an eine Raumtemperatur-Winkelverteilung, an zweite Virialkoeffizienten, Diffusions- und Viskositätsmeßdaten, wobei  $C_2$ ,  $\alpha$  und  $R_M$  (durch entsprechende Berechnung von  $A$ ) variiert wurden, ergab sich ein besonders tiefer und breiter Potentialtopf.

Eine Zusammenstellung der Parameter der drei Potentiale und der rms-Werte enthält Tabelle 9. Der Bereich des Minimums der Potentiale ist in Abbildung 17 dargestellt. Die simulierten Winkelverteilungen können in den Abbildungen 18 und 19 einzeln mit den Meßpunkten verglichen werden.

Tabelle 9: Vergleich des in dieser Arbeit erhaltenen Potentials (siehe Tabelle 8, dritte Spalte) mit dem HFD-A-Potential [Danielson und Keil, 88] und dem HFD-1-Potential [Smith et al., 77].

	diese Arbeit	HFD-A	HFD-1
A/eV	1963.5	2953	8002.7
$\alpha/\text{\AA}^{-1}$	3.352	3.422	3.926
D/\AA	5.12	5.12	5.0304
$C_6/\text{eV } \text{\AA}^6$	11.68	11.68	11.014
$C_8/\text{eV } \text{\AA}^8$	85.80	93.60	56.766
$C_{10}/\text{eV } \text{\AA}^{10}$	772.1	918.9	334.76
$C_{12}/\text{eV } \text{\AA}^{12}$	8749.4	11359	---
$C_{14}/\text{eV } \text{\AA}^{14}$	121737	172415	---
$R_M/\text{\AA}$	3.989	3.997	3.930
$\epsilon/\text{meV}$	2.479	2.636	2.445
$\sigma/\text{\AA}$	3.548	3.565	3.531
rms (22.35meV)	0.808	0.869	1.437
rms (67.20meV)	1.036	1.546	0.808
$\sum$ rms	1.844	2.415	2.245

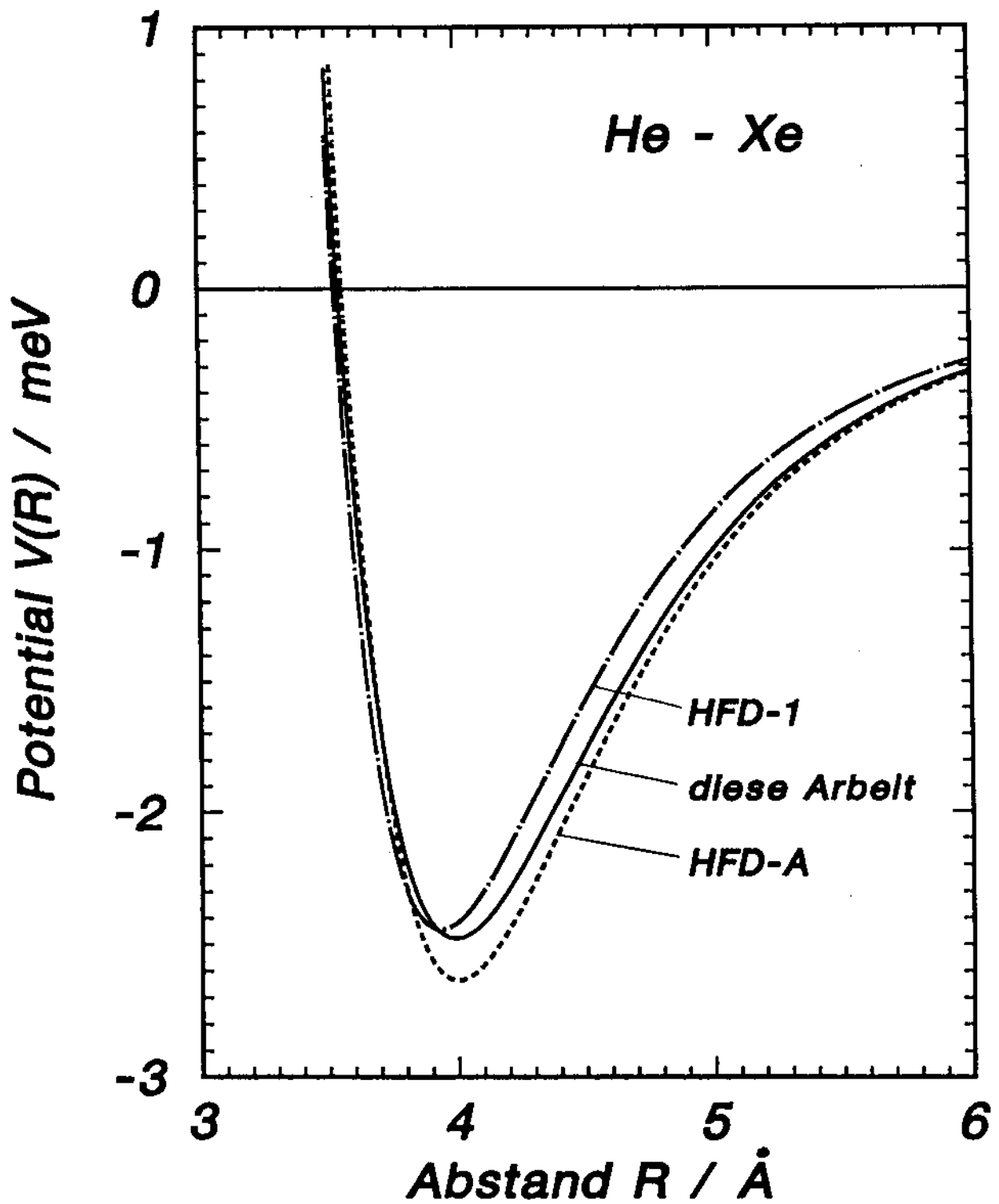


Abbildung 17:

Vergleich des in dieser Arbeit ermittelten He-Xe-Potentials mit dem HFD-A [Danielson und Keil, 88] und dem HFD-1-Potential [Smith et al., 77].

Die geringfügige Inkonsistenz in den Lagen der Oszillationen der beiden Datensätze führt dazu, daß bei den Raumtemperaturdaten der kleinere Wert  $\sigma = 3.53 \text{ \AA}$  des HFD-1-Potentials, bei den 22.35meV-Daten dagegen der Wert des HFD-A-Potentials ( $\sigma = 3.565 \text{ \AA}$ ) die Daten genauso gut wiedergeben wie das Potential dieser Arbeit. Für die jeweils anderen Energien (HFD-A bei 67.20meV und HFD-1 bei 22.35meV) sind deutliche Abweichungen zu erkennen.

Die Unterschiede in der Topftiefe erkennt man vor allem am Verhältnis der Intensitäten im dritten, vierten und fünften Minimum der niederen Energie und im fünften Minimum der höheren Energie. Der HFD-A-Wert ( $\epsilon = 2.636 \text{ meV}$ ) ist zu groß, während der HFD-1-Wert gut mit dem hier gefundenen Potential übereinstimmt.

Während die Unterschiede zwischen dem HFD-1 und dem neuen Potential in den Werten für  $\sigma$  und  $\epsilon$  sehr klein sind, aber in den Winkelverteilungen gerade noch wiederzufinden sind, sticht beim Betrachten der Potentiale in Abbildung 17 eine weitere Diskrepanz im Verlauf der Kurven hervor: Bedingt durch die schwächere Attraktion liegt beim HFD-1-Potential die äußere Wand des Topfes bei kleineren Abständen, der Topf ist also schmaler. Durch den steiler abfallenden Repulsivteil (größeres  $\alpha$ ) wird dies bei kleineren Abständen kompensiert und die inneren Wände des Topfes stimmen fast überein. Das einzige Anzeichen, das in den Winkelverteilungen auf diesen Unterschied hinweist, ist der Sattel im Intensitätsverlauf bei etwa  $6.5^\circ$  in der Verteilung bei niedriger Stoßenergie. Je breiter der Potentialtopf zu größeren Abständen ist, desto ausgeprägter ist diese Struktur und desto besser ist die Anpassung an die hier sehr genauen und dichtliegenden Meßpunkte.



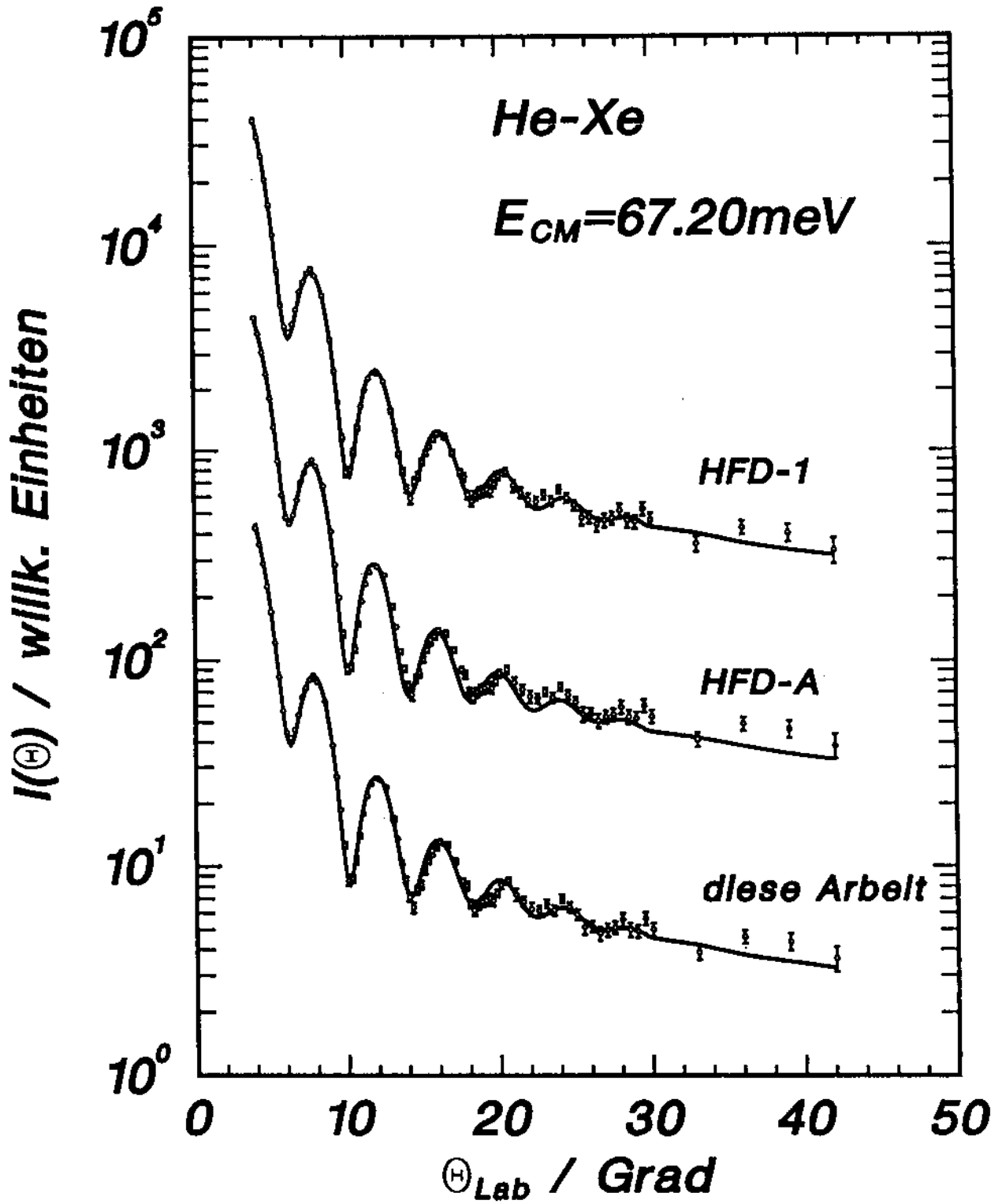


Abbildung 18:

Vergleich gerechneter und gemessener Winkelverteilungen für drei verschiedene Potentiale (siehe Tabelle 9) bei Stoßenergie 67.20meV.

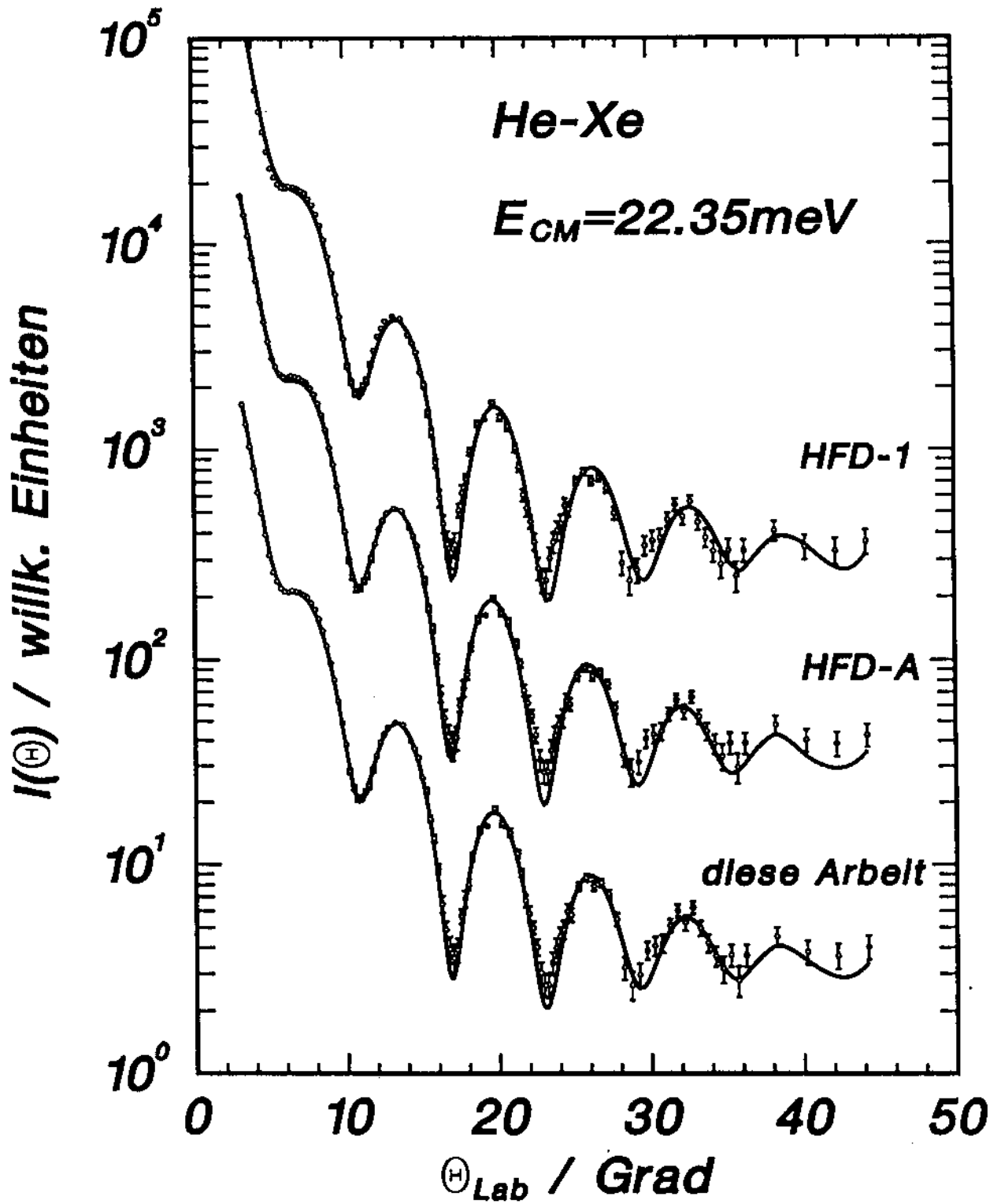


Abbildung 19:

Wie Abbildung 18, jedoch bei Stoßenergie 22.35meV.

Auf eine andere, ebenso aussagekräftige Abhängigkeit zur Untersuchung dieser Potentialregion wird bei [Danielson und Keil, 88] hingewiesen: Die zweiten Virialkoeffizienten bei niedrigen Temperaturen reagieren sehr empfindlich auf die Lage der äußeren Wand des Potentialtopfes, falls der Rest des Potentials festliegt. In Abbildung 20 sind die Werte  $B_{12}(T)$  aufgetragen. Die Meßwerte im oberen Temperaturbereich sind aus der Arbeit von [Brewer, 67], die im unteren Bereich aus der Arbeit von [Kate und Robinson, 73] entnommen. Auch wenn die Fehler bei etwa  $\pm 1$  bis  $\pm 2 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$  liegen, kann dennoch das HFD-1 Potential die Messungen unterhalb 150K nicht wiedergeben. Daher stellt das in dieser Arbeit vorgestellte Potential eine deutlich bessere Beschreibung der Wechselwirkung dar. Es verbindet die geringere Topftiefe des HFD-1 Potentials mit der größeren Ausdehnung des Topfes beim HFD-A Potentials. Nach Abschluß dieser Berechnungen sind neue Ergebnisse der Gruppe aus Alberta eingetroffen [Danielson et al., 87]. Auf der Grundlage neuer SCF-Berechnungen von Dr. Tom Dingle (University of Victoria, Canada) sind dort neue Anpassungen an die Meßwerte, aus denen das HFD-A-Potential hergeleitet wurde, vorgenommen worden. Mit dem berechneten Repulsivteil

$$\begin{aligned}
 (6.5.1.) \quad V_{\text{Rep}} &= A \exp(-\alpha R - \beta R^2) \\
 \alpha &= 2.764 \text{ \AA}^{-1} \\
 \beta &= 0.0890 \text{ \AA}^{-2}
 \end{aligned}$$

ergaben sich noch größere Werte für den Nulldurchgang ( $\sigma=3.587 \text{ \AA}$ ) und die Topftiefe ( $\epsilon=2.686 \text{ meV}$ ). Beide Tendenzen vergrößern die Diskrepanz zum hier erhaltenen und zum HFD-1-Potential noch. Um diesen Ansatz für den Repulsivteil mit den hier vorgestellten Messungen zu vergleichen, wird mit diesen Werten und nach Gl. (6.2.2.) festgelegtem Nulldurchgang der Dispersionskoeffizient  $C_6$  variiert. Die sich ergebenden Potentiale weisen eine etwas größere Topftiefe von 2.56 bzw. 2.59 meV auf und geben deshalb eine etwas schlechtere Anpassung an die Daten als das hier gefundene Potential.

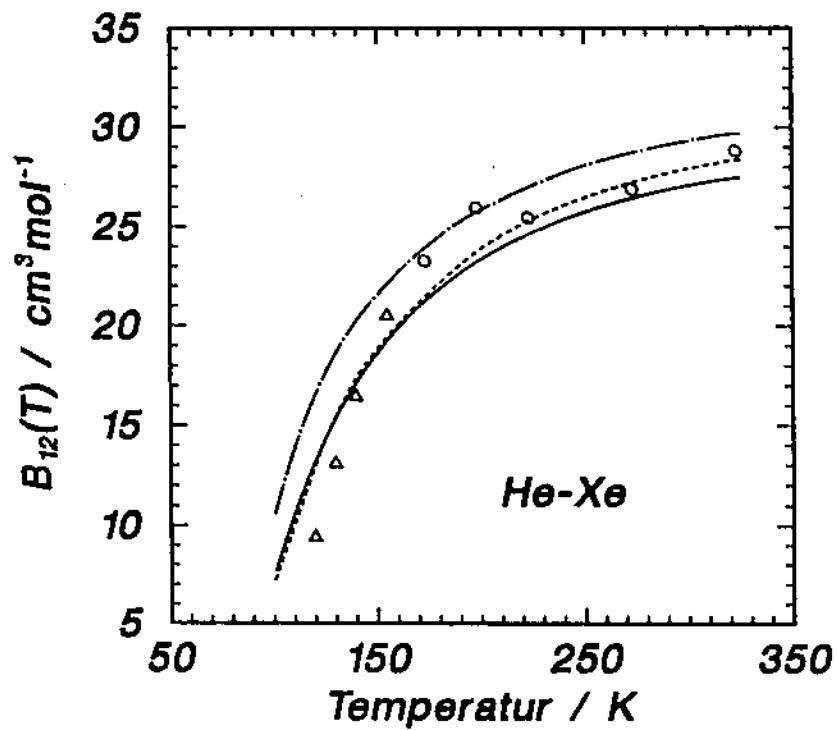


Abbildung 20:

Berechnete Abhängigkeit des zweiten Virialkoeffizienten von der Temperatur:  
 durchgezogene Kurve: berechnet aus dem in dieser Arbeit erhaltenen Potential  
 gestrichelte Kurve : berechnet aus dem HFD-A-Potential  
 Strich-Punkt-Kurve : berechnet aus dem HFD-i-Potential  
 Dreiecke : Messungen von [Kate und Robinson, 73]  
 Kreise : Messungen von [Brewer, 67]

## 7. Helium-Krypton-Querschnitte

### 7.1. Potentialmodell

In einer Studie von [Aziz und Slaman, 86] sind alle zur Verfügung stehenden Meßdaten für das System He-Kr zusammengetragen worden und mehrere Potentialtypen hinsichtlich ihrer Fähigkeit verglichen, die verschiedenen Messungen zu reproduzieren. Darunter sind differentielle Streuquerschnitte, integrale Querschnitte, Virialkoeffizienten, Viskosität und Diffusion. Als eine der besten Anpassungen schlagen die Autoren ein HFD-C-Potentialmodell vor, das eine Modifikation des in Abschnitt 6.1. vorgestellten HFD-Potentials von [Ahlrichs et al., 77] darstellt. Der Repulsivteil wird dadurch flexibler:

$$(7.1.1.) \quad V_{\text{Rep}} = A \cdot R^{\gamma} \exp(-\alpha R) \quad [\text{HFD-C}]$$

Um auch für sehr kleine Kernabstände eine negative Steigung der Potentialfunktion zu erhalten, wird im Bereich  $R < 0.36 \cdot R_M$  die Funktion

$$(7.1.2.) \quad \frac{B}{R} \cdot \exp(-\delta R)$$

eingesetzt. Darüber hinaus existieren zur Beschreibung der He-Kr-Wechselwirkung auch Potentiale in der einfachen HFD-Form.

## 7.2. Vergleich der Literaturwerte

In den schon in Abschnitt 6. (He-Xe) zitierten Arbeiten von [Smith et al., 77] und [Danielson und Keil, 88] finden sich auch Messungen differentieller Streuquerschnitte für das System He-Kr. Entsprechend sind dort die HFD-1- und HFD-A-Potentiale hergeleitet worden. Sämtliche Parameter dieser beiden und des oben erwähnten HFD-C-Potentials von [Aziz und Slaman, 86] sind in Tabelle 10 zusammengestellt. Dabei stellt sich heraus, daß gerade in den Werten für den Nulldurchgang und die Topftiefe, die eine direkte Entsprechung in den differentiellen Querschnitten finden (Lage der Diffraktionsoszillationen bzw. Amplitudenverhältnis der Minima), die Abweichungen der Potentiale untereinander geringer sind als das bei den He-Xe-Werten der Fall ist. Die verschiedenen Werte von  $\sigma$  liegen in einem Intervall von 1.5%, die von  $\epsilon$  in einem Intervall von 6%. Eine Bewertung der Güte der drei Potentiale würde Meßdaten voraussetzen, deren Qualität mindestens so gut wie die der He-Xe-Experimente ist.

## 7.3. Diskussion der Meßergebnisse

Die gemessenen Winkelverteilungen sind in Abbildung 21 für beide Stoßenergien zusammen mit den aus dem HFD-C-Potential berechneten dargestellt. Die Übereinstimmung in der Lage der Oszillationen ist sehr gut, insbesondere ist die Konsistenz der Messungen in diesem Punkt hervorzuheben. Der Wert des HFD-C-Potentials,  $\sigma = 3.262 \text{ \AA}$ , kann mit einer Genauigkeit von mindestens  $\pm 1\%$  bestätigt werden. Der generelle Verlauf der Intensitäten kann hier nicht so gut wie bei den He-Xe-Experimenten wiedergegeben werden. Das zeigt sich besonders in der Höhe der Schulter im 25.08 meV-Querschnitt bei  $6.5^\circ$  und in den Intensitäten der Maxima vor allen bei Raumtemperatur. Diese

Abweichungen sind wahrscheinlich auf die in Abschnitt 4.5. eingeführte Intensitätskorrektur zur Berücksichtigung von Restgasstreuung zurückzuführen, deren simple Form nach Gleichung 4.5.1. bei den He-Kr-Messungen, wo die Korrektur besonders groß sein mußte, nicht genau genug ist. Darüber hinaus liegen in den Minima der 25.08meV-Verteilung Punkte nur im Abstand von  $0.5^\circ$  vor, die außerdem im dritten und vierten Minimum stark streuen, so daß sie eine sehr genaue Bestimmung der Topftiefe nicht zulassen. Jedoch kann der HFD-C-Wert innerhalb eines Intervalls von kleiner als 10% bestätigt werden, was aber zur Diskriminierung der drei Potentiale nicht ausreicht.

Tabelle 10: Vergleich der He-Kr-Potentialparameter

HFD-C: [Aziz et al., 86]

HFD-1: [Smith et al., 77]

HFD-A: [Danielson und Keil, 88]

	HFD-C	HFD-1	HFD-A
A/eV	4292.3		2527
$\gamma/\text{\AA}^{-5.4}$	5.4	--	--
$\alpha/\text{\AA}^{-1}$	6.0563	3.90	3.682
D/\AA	5.6451	4.736	4.739
$C_6/\text{eV } \text{\AA}^6$	8.087	(1)	8.007
$C_8/\text{eV } \text{\AA}^8$	35.22	(1)	48.6
$C_{10}/\text{eV } \text{\AA}^{10}$	264.7	(1)	(2)
$C_{12}/\text{eV } \text{\AA}^{12}$	--	--	(2)
$C_{14}/\text{eV } \text{\AA}^{14}$	--	--	(2)
B/eV \AA	1099	--	--
$\delta/\text{\AA}^{-1}$	1.939	--	--
$R_M/\text{\AA}$	3.642	3.70	3.702
$\epsilon/\text{meV}$	2.663	2.508	2.667
$\sigma/\text{\AA}$	3.262	3.31	3.299

(1) Werte aus [Tang et al., 76]

(2) Rekursiv berechnet nach [Douketis et al., 82]



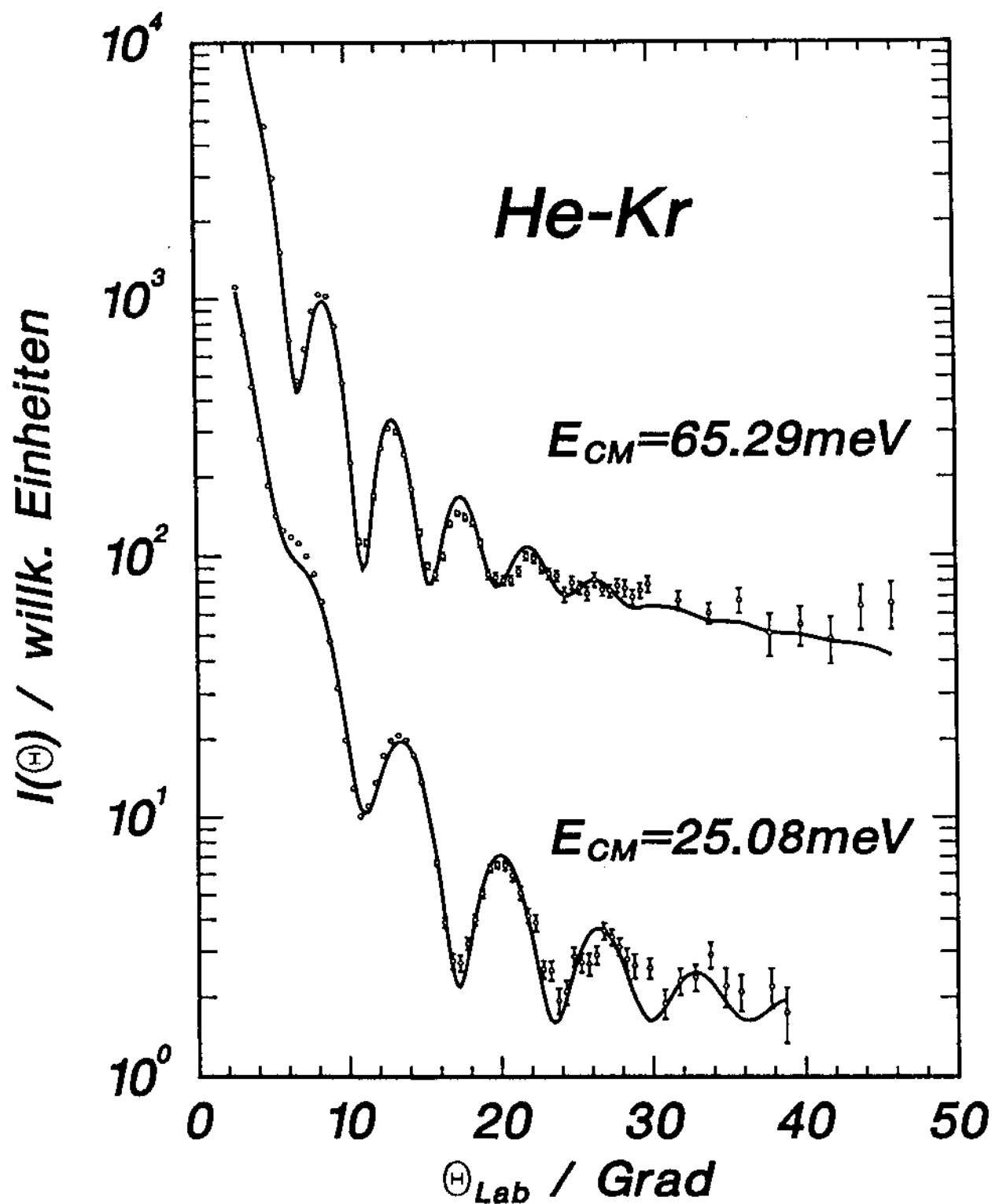


Abbildung 21: Winkelverteilung für He-Kr

Vergleich der gemessenen Verteilungen mit den aus dem HFD-C-Potential [Aziz und Slaman, 86] berechneten.

## 8. Querschnittsberechnungen für das System Neon-Methan

### 8.1. Einleitung

Neben der Untersuchung von Edelgassystemen, wo nur elastische Streuung durch isotrope Wechselwirkung auftritt, können Molekülstrahlexperimente auch für die Berechnung zur Bestimmung der Potentialflächen von Atom-Molekül-Systemen erfolgreich eingesetzt werden. Dazu können Messungen totaler integraler oder differentieller Streuquerschnitte sowie Energieverlustspektren beitragen. Hier werden Untersuchungen der Wechselwirkung von Neon mit dem Tetraedermolekül Methan vorgestellt, das durch seine hohe Symmetrie einem Edelgasatom recht nahe kommt. Die wesentliche Fragestellung ist nun, inwieweit eine rein elastische Behandlung für die Berechnung von totalen Streuquerschnitten gerechtfertigt ist, oder ob auch für diese Querschnitte die anisotrope Wechselwirkung berücksichtigt werden muß.

### 8.2. Vergleich der bisher veröffentlichten Potentiale

Bei [Buck et al., 85] ist erstmals über eine vollständige Bestimmung der Potentialfläche für das System Ne-CH<sub>4</sub> berichtet worden. Verwendet wurden totale differentielle Streuquerschnitte mit Diffraktionsstruktur und Energieverlustspektren für eine Reihe von Streuwinkeln. Zusammen mit SCF-Rechnungen für den Repulsivteil des Potentials und gedämpften Dispersionskräften konnte eine Potentialfläche bestimmt werden, die es ermöglichte, mit quantenmechanischen "Coupled-States"-Berechnungen die meisten Meßdaten gut zu reproduzieren. Jedoch blieb in der Topftiefe des isotropen Potentialanteils noch eine Diskrepanz zwischen Messung und Rechnung. Den Anlaß für neue Berechnungen an diesem System bieten jüngste Ergebnisse, die signifikant andere Werte für die Topftiefe  $\epsilon$  und den Minimumsabstand  $R_M$

ergeben (s. Tabelle 11) als die in der oben erwähnten Veröffentlichung angegebenen (4.80meV und 3.83Å): Aus integralen Streuquerschnitten werden bei [Liuti et al., 88] Werte von 5.56meV und 3.74Å hergeleitet. Zur Kontrolle wurden von den Autoren mit dem Potential von [Buck et al., 85] ebenfalls integrale Querschnitte gerechnet. Aus dem Vergleich der Lage der Glorienoszillationen ergibt sich, daß bei letzterem Potential das Produkt  $\epsilon \cdot R_M$  deutlich zu klein ist. Aus Messungen totaler differentieller Streuquerschnitte bei drei verschiedenen Stoßenergien ist bei [O'Loughlin et al., 85] durch Anpassungen ein Potential mit  $\epsilon=5.69\text{meV}$  und  $R_M=3.68\text{Å}$  gewonnen worden, wobei allerdings nur die isotrope Wechselwirkung zugrunde gelegt wurde. Diese Diskrepanz ist umso erstaunlicher, als die gleiche Meßgröße wie bei [Buck et al., 85] verwendet wurde und, wie in Kapitel 6.2 dargestellt, die Bestimmung des Nulldurchgangs (und des eng damit zusammenhängenden Gleichgewichtsabstands  $R_M$ ) aus der Lage der Diffraktionsoszillationen sehr genau ist. Es wird gezeigt, daß diese Abweichung ihre Ursache darin hat, daß die elastische Näherung für die Berechnung der Diffraktionsoszillationen nicht angemessen ist.

Tabelle 11: Potentialparameter der isotropen Ne-CH<sub>4</sub>-Wechselwirkung. Angegeben sind Topftiefe und Minimumsabstand der Potentiale sowie der Typ der gemessenen Querschnitte und die angewandten Rechenverfahren.

Quelle	Meßgröße	Berechnung	$\epsilon/\text{meV}$	$R_M/\text{Å}$
[Buck et al., 85]	tot. diff.	CS	4.80	3.83
[O'Loughlin et al., 85]	tot. diff.	elastisch	5.69	3.68
[Liuti et al., 88]	integral	elastisch	5.56	3.74
diese Arbeit	tot. diff.	elastisch	6.50	3.60
diese Arbeit	tot. diff.	CS	5.50	3.78
	+integral	elastisch		

### 8.3. Bestimmung eines neuen isotropen Potentials

Durch Anpassung an die bei Raumtemperatur gemessenen totalen differentiellen Streuquerschnitte und an die Energieverlustspektren (Flugzeitspektren der auf einen Winkel gestreuten Teilchen) konnte der anisotrope und der isotrope Teil der Wechselwirkung bestimmt werden [Buck et al., 85]. Zur Querschnittsberechnung wurde die sogenannte " $j_z$ -conserving-coupled-states"-Näherung (CS) benutzt. Als Potentialmodell wird ein HFD-Potential (vgl. Abschnitt 6.1) zugrundegelegt. Da der Repulsivteil auch richtungsabhängig bekannt ist und die Dispersionskoeffizienten mit Kombinationsregeln aus denen für die Methan-Methan- bzw. denen für die Neon-Neon-Wechselwirkung berechnet wurden, blieb für Anpassungsrechnungen nur der Parameter der Dämpfungsfunktion frei. Abbildung 22 zeigt einen Vergleich der Messung von A. Kohlhasse mit dem gemittelten totalen differentiellen Streuquerschnitt (durchgezogene Kurve): Während die Lage der Oszillationen recht gut wiedergegeben wird, deutet dagegen das zu steile Abfallen der gerechneten Kurve auf einen zu flachen Topf hin.

Aufschlußreich ist der Vergleich mit dem rein elastisch berechneten Querschnitt (gestrichelte Kurve in Abb. 22). Es zeigt sich, daß diese Näherung nicht angemessen ist. Man erhält einen zu kleinen Abstand der Oszillationen und deutlich zu große Amplituden. Somit wird auch die Diskrepanz zu dem Ergebnis von [O'Loughlin et al., 85] verständlich. Eine Auswertung, die nur elastische Streuung berücksichtigt, muß zu einem zu kleinen Wert von  $R_M$  und zu einem zu großen Wert von  $\epsilon$  führen. Um diesen Einfluß der elastischen Näherung zu verdeutlichen, wurde eine einfache Anpassung auf der Basis dieser Näherung durchgeführt. Man erhält mit einem MSV-Potential (s. unten)  $\epsilon = 6.50 \text{ meV}$  und  $R_M = 3.60 \text{ Å}$ , was diese Tendenz bestätigt. Die Anpassung zeigt Abbildung 23. Besonders auffällig ist die fehlende Dämpfung der Amplituden durch die Beiträge inelastischer Stöße.

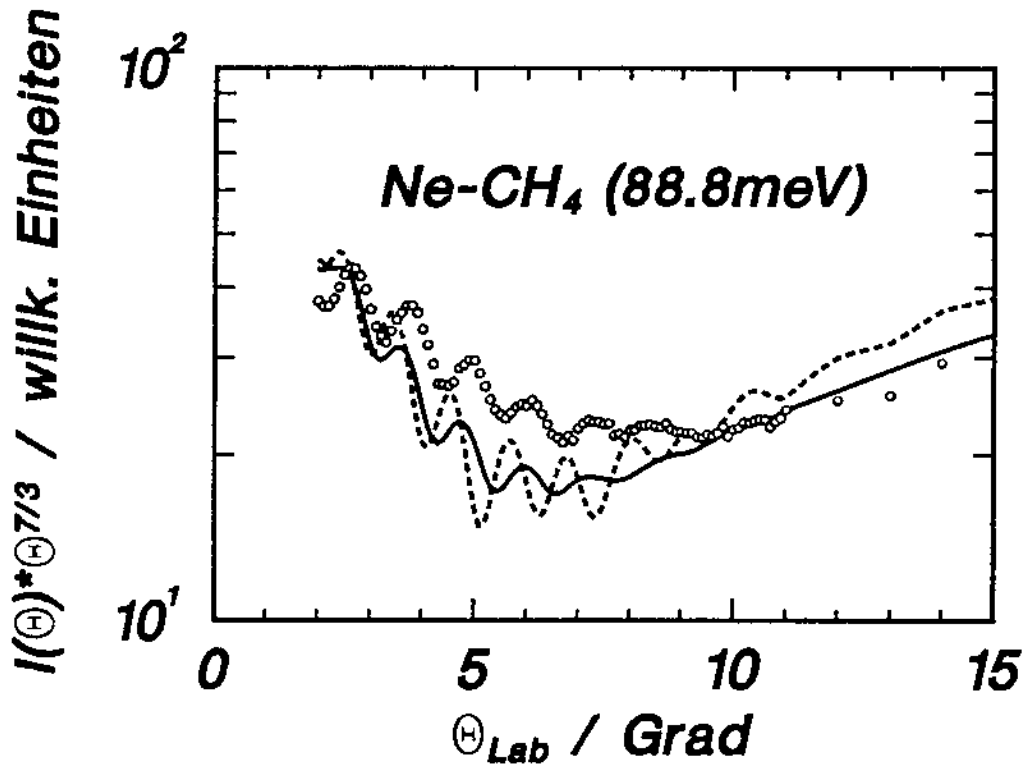


Abbildung 22: Vergleich der elastischen mit der CS-Rechnung

Dargestellt sind totale differentielle Streuquerschnitte, die aus dem bei [Buck et al., 85] vorgeschlagenen Potential in elastischer Näherung (gestrichelte Kurve) und in quantenmechanischer CS-Näherung berechnet worden sind. Die Messung ist von A. Kohlhasse.

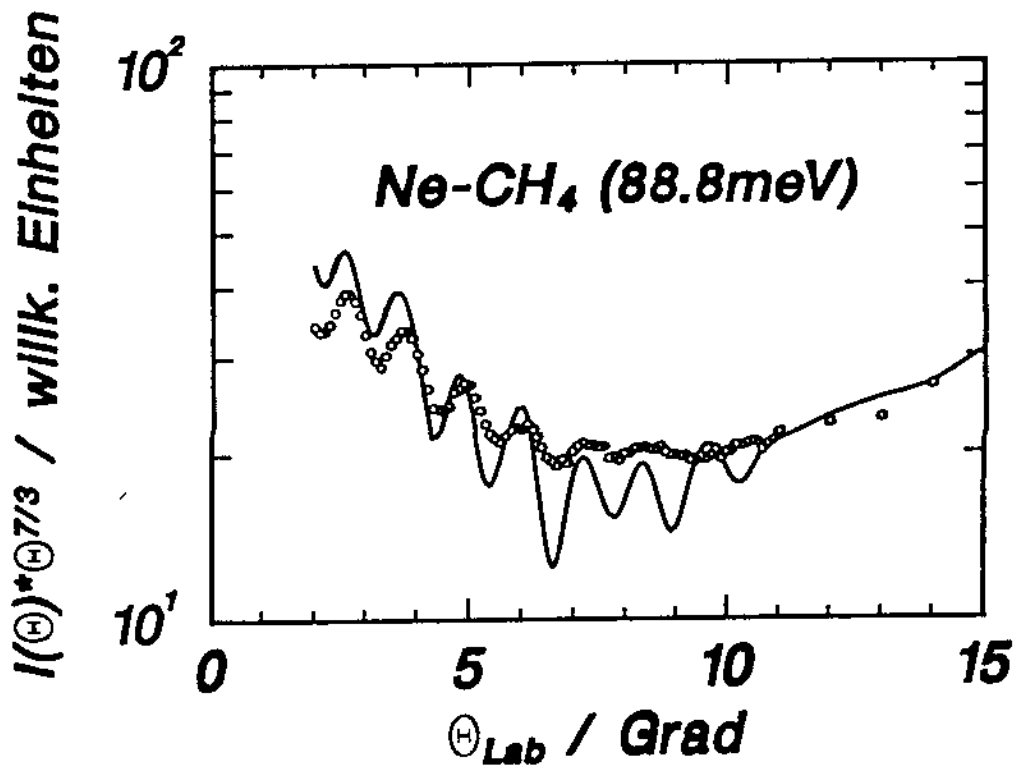


Abbildung 23:

Ergebnis der Anpassung eines MSV-Potentials nach Gleichung (8.1) auf der Basis der elastischen Näherung. Die Grafik zeigt den differentiellen Querschnitt im Vergleich zu den Meßpunkten.

Zur Bestimmung des neuen isotropen Potentials  $V_0$  für Neon-Methan wird daher stets die CS-Näherung bei der Berechnung von Querschnitten verwendet. Die Potentiale  $V_3$  und  $V_4$ , die den anisotropen Anteil der Wechselwirkung beschreiben, entsprechen den bei [Buck et al., 85] angegebenen. Für das isotrope Potential wird die Morse-Spline-van der Waals-Form (MSV) benutzt mit

$$\begin{aligned}
 (8.1.) \quad & x = R/R_M \\
 & V_0(R) = f(x) \cdot \epsilon \\
 & f(x) = \exp[-2\beta(x-1)] - 2\exp[-\beta(x-1)] \quad x \leq x_3 \\
 & f(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 \quad x_3 \leq x \leq x_4 \\
 & f(x) = -c_6 x^{-6} - c_8 x^{-8} \quad x \geq x_4 \\
 \text{wobei} \quad & c_6 = C_6/(\epsilon R_M^6), \quad c_8 = C_8/(\epsilon R_M^8) \quad .
 \end{aligned}$$

Bei der Berechnung der totalen differentiellen Querschnitte wird die Apparaturmittelung, wie in Abschnitt 5.1. und 5.2. beschrieben, berücksichtigt. Jeder partielle Querschnitt muß einzeln gemittelt werden, da sich für jeden einzelnen Querschnitt aufgrund der verschiedenen Energieüberträge ein anderes Newton-Diagramm ergibt. Die Winkel- bzw. Energieauflösung ist durch  $\delta = 1.02^\circ$  und  $\Delta g/g = 8\%$  gegeben.

Bei der Anpassung von  $V_0$  an die von A. Kohlhasse gemessenen Winkelverteilungen wird das Produkt  $\epsilon \cdot R_M$  auf dem bei [Liuti et al., 88] angegebenen Wert festgehalten. Obwohl dort auch nur elastische Streuung für die Auswertung berücksichtigt wurde, kann das Ergebnis aus zwei Gründen als zuverlässig angesehen werden: 1) Die Lage der Gloriensoszillationen ist (ähnlich wie der Regenbogen) nicht so empfindlich wie die Lage von Diffraktionsoszillationen von der Anisotropie des Potentials abhängig. 2) Die Experimente zur Bestimmung des integralen Querschnitts sind an einem effusiven Molekularstrahl durchgeführt worden. Daher ist die Anfangsverteilung der Rotationszustände einer Boltzmann-Verteilung. Das führt zu einer Mittelung über viele Rotationsübergänge. Im Gegensatz dazu sind im Düsenstrahl nur die untersten Zustände bevölkert.

Im Ergebnis erhält man für die Tiefe und die Lage des Minimums von  $V_0$  die Werte  $\epsilon=5.50\text{meV}$  und  $R_M=3.78\text{\AA}$ . Die Werte der anderen Parameter wurden aus der Arbeit von [Liuti et al., 88] entnommen:

$$\text{Morse:} \quad \beta = 6.97$$

$$\text{Dispersion: } C_6 = 18.727, C_8 = 93.633$$

$$\text{Spline:} \quad x_3 = 1.10, x_4 = 1.50$$

Für die Koeffizienten der Spline-Parabel ergeben sich:

$$a = -19.794, b = 37.433 \quad c = -24.006, d = 5.197$$

Der daraus berechnete totale differentielle Querschnitt ist in Abb. 24 zusammen mit den Meßwerten zu sehen. Die Anpassung ist wesentlich besser als die in Abb. 22 gezeigte. Einen Vergleich der Potentialkurven ermöglicht Abb. 25: Das asymptotische Verhalten von  $V_0$  ist für beide Kurven das gleiche, jedoch ist beim MSV-Potential das Minimum 15% tiefer, dessen Lage ist um 1.3% nach innen verschoben. Hierin zeigt sich, daß in diesem Fall das HFD-Potential bei der ersten Anpassung nicht flexibel genug war.

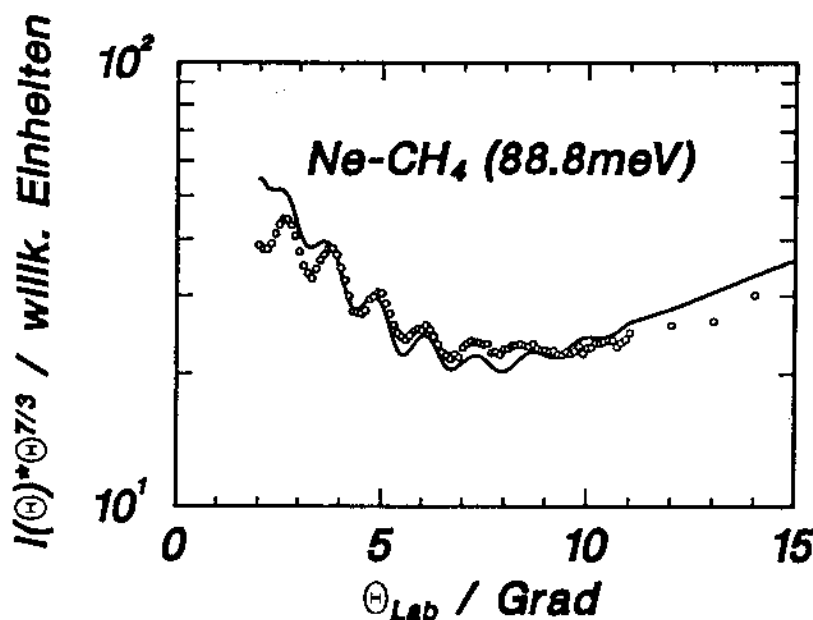


Abbildung 24:

Ergebnis der Anpassung eines MSV-Potentials nach Gleichung (8.1) mit Hilfe der CS-Näherung. Dargestellt ist der berechnete totale differentielle Querschnitt im Vergleich zu den entsprechenden Meßpunkten.

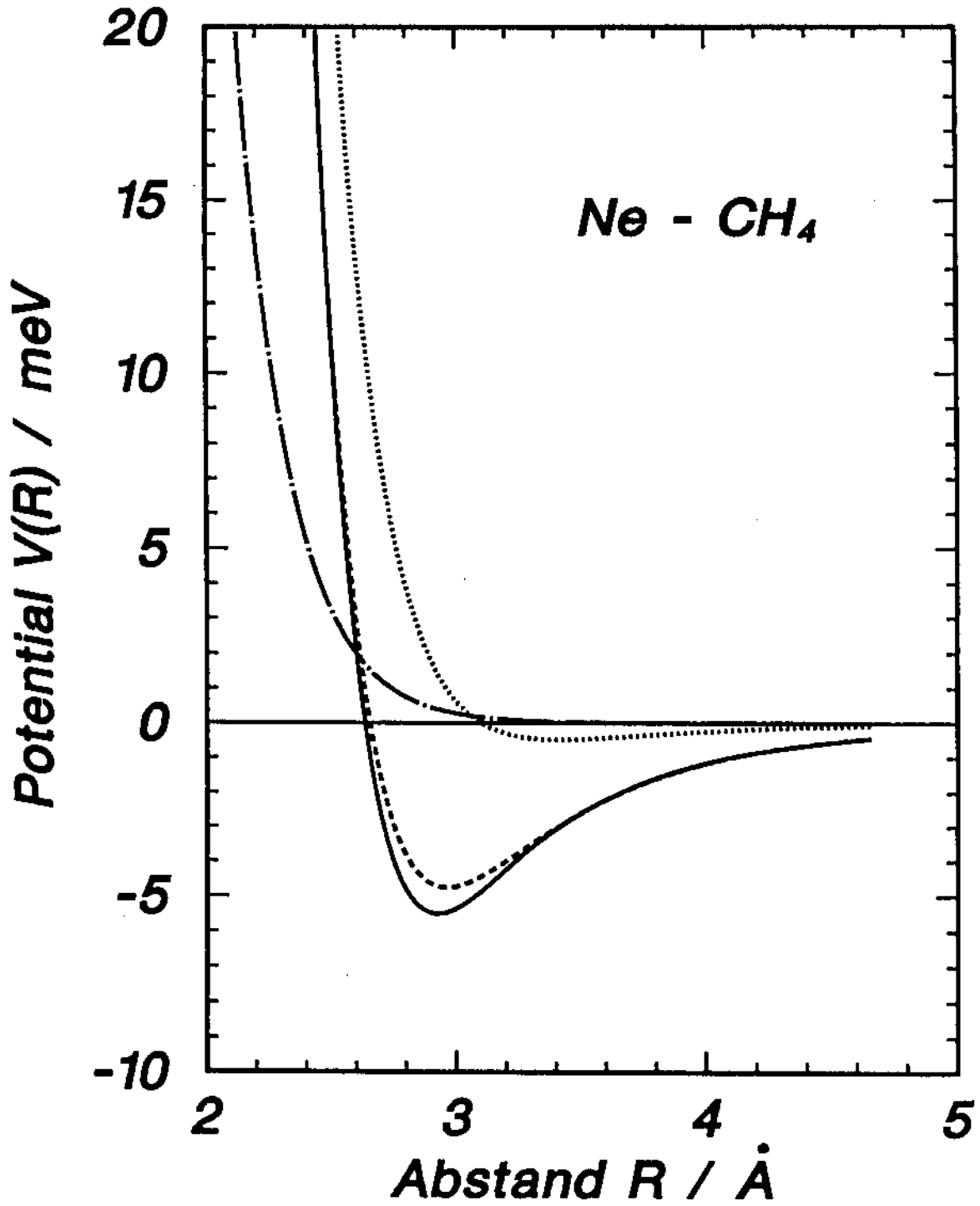


Abbildung 25: Potentialfunktionen  
durchgezogen:  $V_0$  (diese Arbeit), MSV  
gestrichelt:  $V_0$  [Buck et al., 85], HFD  
gepunktet:  $V_3$  "  
Strich-Punkt:  $-V_4$  "



#### 8.4. Zusammenfassung

Es konnte gezeigt werden, daß für die Simulation von Diffraktionsoszillationen eine elastische Berechnung dann nicht ausreicht, wenn im Experiment nach einer Düsenstrahlexpansion alle Methanmoleküle in den Grundzustand relaxiert sind. Dadurch konnte die große Abweichung des bei [O'Loughlin et al., 85] veröffentlichten Potentials von dem bei [Buck et al., 86] angegebenen erklärt werden. Letzteres konnte noch verbessert werden durch Anpassung eines MSV-Potentials an die gleiche Messung eines totalen differentiellen Streuquerschnitts unter Einhaltung des Produktes der bei [Liuti et al., 88] publizierten Werte für  $\epsilon$  und  $R_M$ . Als Werte für das neue isotrope Potential des Systems Neon-Methan ergeben sich  $\epsilon=5.50\text{meV}$  und  $R_M=3.78\text{\AA}$ .

## 9. Zusammenfassung

An einer neuen Kreuzstrahlapparatur, die durch die Einsatzmöglichkeit von Düsenstrahlen und einen Universaldetektor mit Elektronenstoßionisator gekennzeichnet ist, wurden in Streuexperimenten bei je zwei Stoßenergien (etwa 25 bzw. 65 meV) hochaufgelöste Winkelverteilungen für die Stoßpartner Helium-Krypton und Helium-Xenon gemessen.

Die van der Waals-Wechselwirkung dieser Edelgaspaare zeichnet sich durch eine besonders flache Potentialmulde aus, so daß keine Regenbogenstruktur in den gemessenen Verteilungen zu sehen ist. Diese weisen aber wegen der kleinen reduzierten Massen ausgeprägte Diffraktionsoszillationen auf, die aufgrund der hohen Winkel- und Energieauflösung der Meßanordnung eine Tiefe von bis zu einer Zehnerpotenz haben und damit insbesondere bei He-Xe an Genauigkeit die bisher veröffentlichten Meßdaten für dieses System übertreffen.

Durch den Vergleich berechneter differentieller Streuquerschnitte unter sorgfältiger Berücksichtigung der Mittelungseinflüsse können Potentiale durch Variation von Parametern an die Meßdaten angepaßt werden. Dabei kann der Nulldurchgang aus der Lage der Diffraktionsoszillationen mit einer Genauigkeit von besser als  $\pm 1\%$  bestimmt werden und stellt damit die genaueste Meßgröße dar. Sichere Rückschlüsse über die Tiefe des Potentialtopfes lassen die Intensitäten in den Minima der Querschnitte zu, die das unterschiedlich einsetzende Abklingen der Oszillationen widerspiegeln. Dadurch wird die Bestimmung der Tiefe mit einer Genauigkeit von  $\pm 5\%$  ermöglicht. Außerdem wurde im Bereich der Kleinwinkelstreuung bei der niedrigeren Stoßenergie eine Sattelstruktur in den Winkelverteilungen gefunden, die von der äußeren Wand des Potentialtopfes abhängt. Zusammen mit Messungen des zweiten Virialkoeffizienten im Bereich niedriger

Temperaturen [Kate und Robinson, 73] können bei sonst vorgegebenem Potentialverlauf die Absolutwerte des Potentials im Bereich des Wendepunktes auf 5-10% genau bestimmt werden.

Für das System Helium-Xenon wurde ein neues Wechselwirkungspotential mit  $\epsilon=2.479\text{meV}$ ,  $\tau=3.548\text{\AA}$  und  $R_M=3.989\text{\AA}$  bestimmt, das die Diskrepanz zwischen dem HFD-1-Potential [Smith et al., 77] und dem HFD-A-Potential [Danielson und Keil, 88] klärt. Im Vergleich zum hier erhaltenen stellt sich das HFD-A-Potential mit  $\epsilon=2.636\text{meV}$  als deutlich zu tief heraus, während sich der Topf des HFD-1-Potential nach außen hin als zu schmal erweist.

Für das System Helium-Krypton sind die Meßdaten von nicht ganz so guter Qualität. Sie erlauben bei gleicher Genauigkeit in der Lage der Oszillationen eine Bestimmung von  $\epsilon$  nur innerhalb eines Intervalls von  $\pm 10\%$ . Hier wird ein von [Aziz und Slaman, 86] aus der Analyse einer Reihe verschiedener Meßdaten gefundenes Potential bestätigt, aber auch andere Potentiale liegen innerhalb der Fehlergrenzen.

Anhang: Werte der experimentellen Winkelverteilungen

Für die vier gemessenen Winkelverteilungen sind hier die einzelnen Meßwerte aufgestellt. Die Werte für den Streuwinkel  $\theta$  und die Streusignale  $I(\theta)$  sind wie in Abschnitt 5.3.d beschrieben korrigiert. Die Fehler  $\sigma$  entsprechen einer Standardabweichung.

He-Kr, 25.08meV

$\theta$	$I(\theta)$	$\sigma$	$\theta$	$I(\theta)$	$\sigma$
2.75	42598.1	86.3	19.75	248.6	8.3
3.25	27820.3	33.3	20.25	247.5	11.2
3.75	17384.7	53.4	20.75	226.7	12.3
4.25	10733.5	45.6	21.25	194.2	12.1
4.75	7082.8	17.0	21.75	158.4	10.9
5.25	5393.6	17.3	22.25	148.4	11.8
5.75	4749.9	14.9	22.75	97.7	8.0
6.25	4493.4	14.1	23.25	96.6	8.6
6.75	4257.8	13.3	23.75	74.4	8.4
7.25	3820.4	11.1	24.25	80.2	8.7
7.75	3265.9	11.8	24.75	109.5	9.9
8.25	2570.3	11.9	25.25	103.8	9.1
8.75	1824.3	9.1	25.75	102.4	10.0
9.25	1204.7	7.5	26.25	111.2	9.5
9.75	756.2	9.8	26.75	138.0	10.9
10.25	493.5	6.5	27.25	130.7	9.6
10.75	385.6	7.2	27.75	119.7	9.9
11.25	424.0	7.2	28.25	107.2	11.3
11.75	519.9	6.6	28.75	101.2	11.2
12.25	660.6	7.2	29.75	98.8	9.1
12.75	755.0	6.8	30.75	72.7	9.6
13.25	792.9	7.2	31.75	88.3	10.6
13.75	762.0	7.5	32.75	91.1	10.6
14.25	664.2	7.7	33.75	111.5	13.2
14.75	523.5	6.9	34.75	84.3	14.4
15.75	253.8	7.4	35.75	80.3	12.8
16.25	148.8	7.2	36.75	47.6	14.0
16.75	105.1	7.6	37.75	84.0	14.7
17.25	103.3	7.8	38.75	67.2	16.1
17.75	123.3	7.0	40.75	40.7	16.3
18.25	152.4	8.2	42.75	26.0	18.7
18.75	193.3	7.6	44.75	19.7	23.3
19.25	241.0	9.1			

He-Kr, 65.29meV

$\theta$	$I(\theta)$	$\sigma$	$\theta$	$I(\theta)$	$\sigma$
2.75	50575.9	85.3	17.75	413.2	14.5
3.25	33391.6	47.7	18.25	391.9	12.6
3.75	26056.5	86.9	18.75	328.7	12.9
4.25	20051.0	29.5	19.25	250.2	11.7
4.75	14488.3	27.6	19.75	243.4	11.4
5.25	9005.6	18.8	20.25	237.2	10.9
5.75	4605.2	14.9	20.75	237.3	10.3
6.25	2098.7	10.5	21.25	256.1	11.7
6.75	1454.5	9.8	21.75	291.5	11.7
7.25	1938.3	11.6	22.25	285.5	11.7
7.75	2719.3	11.6	22.75	262.4	12.3
8.25	3145.1	14.8	23.25	250.0	13.0
8.75	3094.7	13.1	23.75	244.2	12.0
9.25	2362.0	10.8	24.25	207.8	13.9
9.75	1416.4	11.2	24.75	229.6	13.9
10.25	681.5	12.0	25.25	220.0	12.9
10.75	339.9	9.0	25.75	208.7	12.9
11.25	336.0	10.7	26.25	235.1	15.4
11.75	505.0	14.5	26.75	215.0	12.0
12.25	773.2	9.4	27.25	213.0	13.1
12.75	923.7	10.2	27.75	222.6	13.8
13.25	894.5	21.8	28.25	217.3	17.0
13.75	730.9	10.5	28.75	200.7	14.1
14.25	533.6	8.7	29.25	212.4	14.8
14.75	364.9	11.0	29.75	224.2	16.1
15.25	272.3	9.4	31.75	193.5	16.8
15.75	251.8	12.0	33.75	172.7	16.4
16.25	296.2	10.5	35.75	192.1	21.5
16.75	390.6	10.8	37.75	143.6	26.9
17.25	428.8	11.1	39.75	154.0	26.8
			41.75	136.2	28.0
			43.75	179.9	35.1
			45.75	183.0	37.7

He-Xe, 22.35meV

$\theta$	$I(\theta)$	$\sigma$	$\theta$	$I(\theta)$	$\sigma$
3.20	13482.5	57.5	17.20	32.0	4.4
3.45	10838.2	33.1	17.45	46.3	3.8
3.70	8493.5	53.7	17.70	56.4	5.5
3.95	6656.7	12.9	17.95	65.7	3.9
4.20	5105.5	16.9	18.20	89.1	4.1
4.45	4043.4	8.2	18.70	120.2	4.4
4.70	3216.0	11.3	19.20	126.0	2.6
4.95	2585.1	13.8	19.70	152.3	4.8
5.20	2146.9	4.1	20.20	128.9	5.1
5.45	1949.6	9.7	20.70	117.0	5.6
5.70	1801.7	14.5	21.20	92.4	4.5
5.95	1736.4	6.0	21.45	74.7	3.7
6.20	1726.6	6.1	21.70	55.0	3.9
6.45	1759.8	16.3	21.95	47.5	4.4
6.70	1742.0	16.2	22.20	40.9	3.0
6.95	1722.9	13.0	22.45	33.0	3.1
7.20	1671.5	5.3	22.70	24.9	3.1
7.45	1628.7	6.3	22.95	21.7	2.8
7.70	1529.9	3.8	23.20	21.8	3.1
7.95	1425.5	3.1	23.45	27.7	3.6
8.20	1284.9	2.8	23.70	32.8	3.8
8.45	1128.5	8.1	23.95	37.2	3.9
8.70	954.9	3.7	24.20	40.1	4.3
8.95	789.8	12.1	24.45	48.8	4.4
9.20	655.4	6.7	24.70	47.0	3.7
9.45	514.8	2.6	25.20	64.3	3.2
9.70	399.4	9.5	25.70	70.9	3.1
9.95	313.0	6.4	26.20	64.6	3.4
10.20	230.7	6.8	26.70	66.9	3.1
10.45	192.8	6.1	27.20	59.2	3.2
10.70	169.2	5.5	27.70	44.9	3.4
10.95	171.7	5.8	28.20	26.3	3.4
11.20	185.3	5.3	28.70	21.8	3.4
11.45	196.2	7.0	29.20	24.4	3.3
11.70	236.2	7.1	29.70	31.7	3.3
11.95	276.0	6.4	30.20	33.4	3.7
12.20	321.3	5.4	30.70	34.4	3.6
12.45	353.0	2.3	31.20	41.9	3.2
12.70	381.9	6.9	31.70	49.4	3.6
13.20	403.4	5.5	32.20	43.2	3.8
13.70	393.5	6.5	32.70	51.0	3.7
14.20	326.9	7.1	33.20	40.7	3.5
14.45	299.7	4.3	33.70	34.5	3.6
14.70	270.6	4.6	34.20	29.9	3.4
14.95	216.0	4.0	34.70	25.9	3.8
15.20	186.4	7.1	35.20	30.2	3.8
15.45	135.9	5.4	35.70	22.9	3.9
15.70	109.4	4.8	36.20	30.2	3.7
15.95	78.2	4.5	38.20	37.1	4.1
16.20	53.0	5.2	40.20	31.3	4.2
16.45	40.0	4.0	42.20	30.0	4.4
16.70	32.3	4.8	44.20	33.1	4.5
16.95	29.4	4.8			

He-Xe, 67.20meV

$\theta$	$I(\theta)$	$\sigma$	$\theta$	$I(\theta)$	$\sigma$
4.05	9229.4	14.3	14.80	176.1	8.5
4.30	7719.7	37.6	15.05	205.9	8.1
4.55	6245.1	27.8	15.30	228.7	7.7
4.80	4869.3	10.1	15.55	244.2	6.8
5.05	3683.9	7.0	15.80	264.8	7.4
5.05	3683.9	7.0	16.05	283.3	9.2
5.05	3639.3	6.1	16.55	274.3	9.6
5.30	2639.6	18.0	17.05	228.4	8.2
5.30	2639.6	18.0	17.55	182.6	7.1
5.55	1796.6	13.7	17.80	173.5	8.4
5.55	1796.6	13.7	18.05	142.5	7.2
5.80	1225.5	10.6	18.30	132.7	7.5
5.80	1225.5	10.6	18.55	141.2	7.9
6.05	965.1	13.5	18.80	145.9	8.6
6.30	904.1	10.6	19.05	148.2	9.1
6.55	992.5	3.2	19.30	151.3	9.0
6.80	1168.1	12.0	19.55	148.0	9.0
7.05	1421.9	13.9	19.80	160.4	7.5
7.30	1579.6	13.0	20.05	175.3	8.7
7.55	1733.1	12.2	20.55	183.2	8.6
7.80	1824.3	12.6	21.05	157.8	11.2
8.05	1692.6	4.0	21.55	146.0	9.0
8.55	1361.0	10.0	22.05	134.8	10.1
9.05	829.8	10.9	22.55	132.1	7.8
9.30	579.8	8.2	23.05	142.4	7.6
9.55	403.1	7.0	23.55	133.3	7.8
9.80	273.0	10.5	24.05	151.0	7.4
10.05	182.9	9.8	24.55	137.5	7.8
10.30	188.2	8.5	25.05	126.8	7.9
10.55	231.3	9.8	25.55	110.8	9.1
10.80	304.1	9.3	26.05	111.4	7.2
11.05	386.7	10.6	26.55	103.2	8.2
11.30	470.1	9.0	27.05	107.4	8.1
11.55	534.9	7.6	27.55	110.3	7.8
12.05	567.2	10.2	28.05	119.9	9.3
12.55	517.9	9.3	28.55	107.6	8.6
13.05	366.0	10.9	29.05	105.9	7.7
13.30	295.5	7.8	29.55	121.7	9.0
13.55	225.2	6.6	30.05	108.2	8.3
13.80	185.5	7.2	33.05	83.6	7.2
14.05	153.4	7.5	36.05	99.6	7.9
14.30	137.5	8.7	39.05	94.2	9.4
14.55	165.8	7.8	42.05	78.2	11.2

Literaturhinweise

- [Ahlrichs et al., 77] R. Ahlrichs, P. Penco, G. Scoles,  
Chem. Phys. 19, 119 (1977)
- [Andres et al., 82] J. Andres, U. Buck, H. Meyer, J.M. Launay,  
J. Chem. Phys. 76, 1417 (1982)
- [Aziz et al., 79] R.A. Aziz, P.W. Riley, U. Buck, G. Maneke,  
J. Schleusener, G. Scoles, U. Valbusa,  
J. Chem. Phys. 71, 2637 (1979)
- [Aziz und Slaman, 86] R.A. Aziz, M.J. Slaman  
Private Mitteilungen
- [Bosanac et al., 78] S. Bosanac, R.B. Gerber, U. Buck,  
Chem. Phys. Lett. 58, 359 (1978)
- [Brewer, 67] J. Brewer, Air Force Office of Sci. Res.  
Report, Nr. 67-2795 (1967)
- [Buck u. Pauly, 71] U. Buck und H. Pauly, J. Chem. Phys. 54,  
1929 (1971)
- [Buck et al., 78] U. Buck, F. Huisken, H. Pauly, J. Schleu-  
sener, J. Chem. Phys. 68, 3334 (1978)
- [Buck et al., 85] U. Buck, A. Kohlhase, D. Secrest, T.  
Phillips, G. Scoles, F. Grein, Mol. Phys.  
55, 1233 (1985)
- [Buck, 88] U. Buck, in "Atomic and Molecular Beam  
Methods", Herausgeber: G. Scoles, Kapitel  
20: "Elastic Scattering II: Differential  
Cross Sections", Oxford, New York, 1988



- [Child, 74] M.S. Child, Molecular Collision Theory, Academic Press, London, New York, 1974
- [Danielson et al., 87] L. Danielson, M. Keil, T. Dingle, Private Mitteilungen, Dez. 1987
- [Danielson u. Keil, 88] L.J. Danielson, M. Keil  
zur Veröffentlichung in J. Chem. Phys.,  
15.01.1988
- [Douketis et al., 82] C. Douketis, G. Scoles, S. Marchetti, M. Zen, A.J. Thakkar, J. Chem. Phys. 76, 3057 (1982)
- [Düren, 75] R. Düren, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Bericht 102/1975
- [Gerber et al., 78] R.B. Gerber, M. Shapiro, U. Buck, J. Schleusener, Phys. Rev. Lett. 41, 236 (1978)
- [Helbing, 68] R.K.B. Helbing, J. Chem. Phys. 48, 472 (1968), Erratum: J. Chem. Phys. 50, 4123 (1969)
- [Huiskens u. Pertsch, 87] F. Huiskens u. Th. Pertsch, Rev. Sci. Instr. 58, 1038 (1987)
- [Jonsson u. Weare, 86] H. Jonsson u. J.H. Weare, Phys. Rev. Lett. 57, 412 (1986)
- [Kate u. Robinson, 73] F.H. Kate u. R.L. Robinson,  
J. Chem. Thermodynamics 5, 273 (1973)
- [Kesper, 87] J. Kesper, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Bericht 12/1987

- [Kumar u. Meath, 85] A. Kumar, W.J. Meath, Mol. Phys. 54, 823 (1985)
- [Liuti et al., 88] G. Liuti, E. Luzzati, F. Pirani, G.G. Volpi, zur Veröffentlichung in Chem. Phys. Lett.
- [O'Loughlin et al., 85] M.J. O'Loughlin, B.P. Reid, R.K. Sparks, J. Chem. Phys. 83, 5647 (1985)
- [Otten, 83] D. Otten, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Bericht 2/1984
- [Pack, 83] R.T. Pack, J. Chem. Phys. 78, 7217 (1983)
- [Paul et al., 58] W. Paul, H.P. Reinhard, U. v. Zahn, Z. Phys. 152, 143-182 (1958)
- [Pauly u. Toennies, 68] H. Pauly, J.P. Toennies, Meth. Exp. Phys. 7A, 227 (1968)
- [Schleusener, 78] J. Schleusener, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Bericht 15/1978
- [Smith et al., 77] K.M. Smith, A.M. Rulis, G. Scoles, R.A. Aziz, V. Nain, J. Chem. Phys. 67, 152 (1977)
- [Tang et al., 76] K.T. Tang, J.M. Norbeck, P.R. Certain, J. Chem. Phys. 64, 3063 (1976)
- [Tang u. Toennies, 83] K.T. Tang, J.P. Toennies, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Bericht 107/1983
- [Winter, 86] M. Winter, Diplomarbeit, Göttingen 1986

Danksagung

Diese Arbeit entstand in der Abteilung Atom- und Molekülphysik des Max-Planck-Instituts für Strömungsforschung in Göttingen am Lehrstuhl für angewandte Mechanik und Strömungsforschung unter Leitung von Prof. Dr. H. Pauly.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. U. Buck für die wissenschaftliche Betreuung und die vielen interessanten Diskussionen und Hinweise während der Anfertigung dieser Arbeit.

Allen Mitarbeitern/innen dieses Instituts, die mich bei der Durchführung der Experimente und der Berechnungen unterstützt haben oder mir hilfreiche Anregungen gaben, spreche ich hiermit meinen Dank aus. Außerdem möchte ich meinem Bruder für die Hilfe bei der Erstellung der technischen Zeichnungen danken.

HERZ

LICHEN

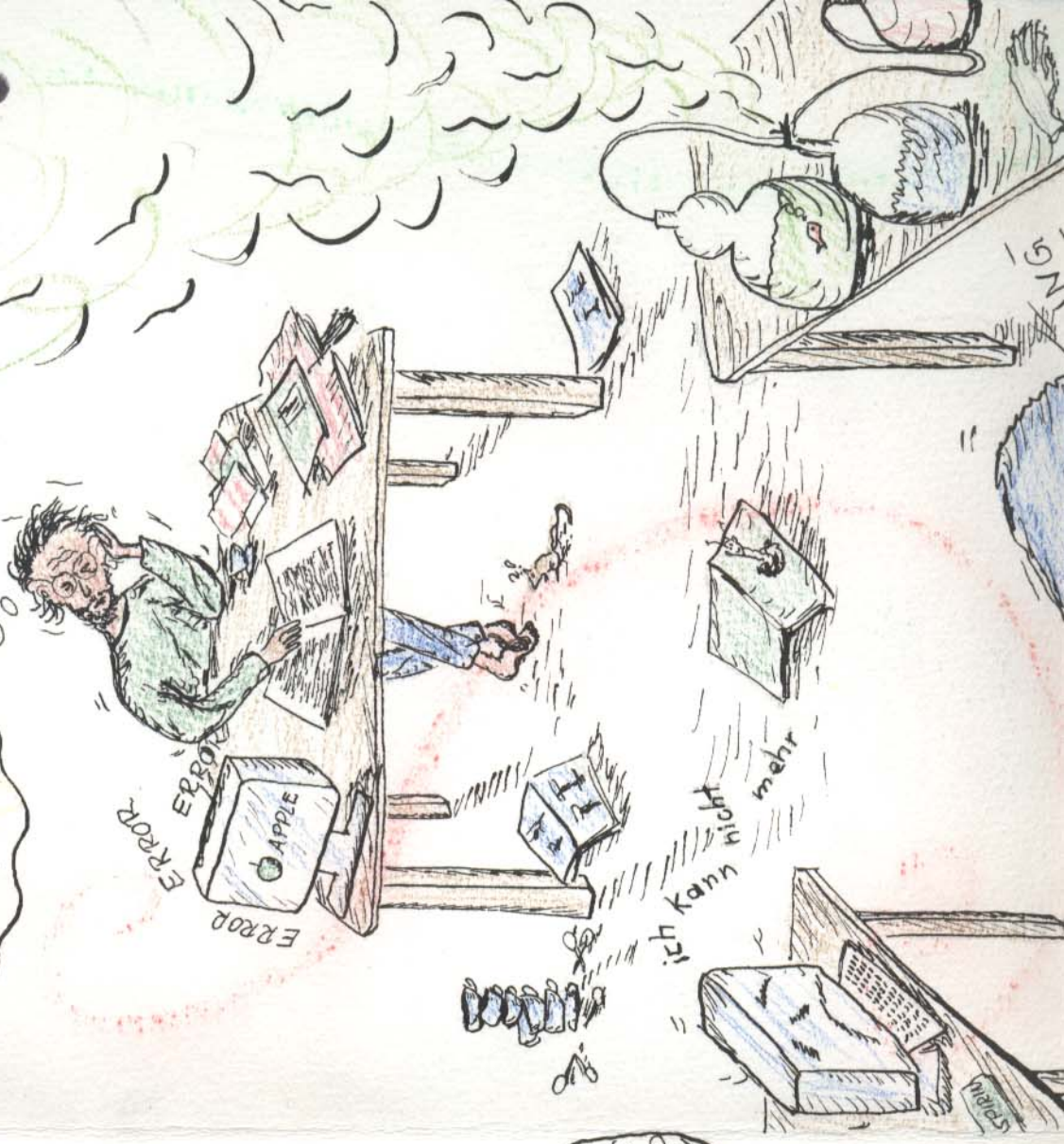
GLÜCK

WUNSCH



ENDLICH  
GESCHAFFT!

PRINT INPUT  
 $V = y \cdot \pi$   
 CHAOS  
 $\Omega = \pi \cdot \pi$   
 $E = mc^2$   
 $5 \pi^2$  RETURN



und bleib  
weiterhin so  
genial...



YOURS FAMILY